

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
Пермский национальный исследовательский политехнический университет

На правах рукописи

РОМАНОВ Кирилл Андреевич

**МНОГОУРОВНЕВЫЕ КОНСТИТУТИВНЫЕ МОДЕЛИ НЕУПРУГОГО
ДЕФОРМИРОВАНИЯ МЕТАЛЛОВ С ОПИСАНИЕМ ИЗМЕЛЬЧЕНИЯ
ЗЕРЕННОЙ СТРУКТУРЫ**

1.2.2. Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Диссертация
на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

Научный руководитель:
д-р физ.-мат. наук, доцент
Швейкин Алексей Игоревич

Пермь 2025

Содержание

Сокращения.....	4
Основные обозначения	5
Введение	7
1. Анализ современного состояния в области исследования процессов термомеханической обработки методами интенсивной пластической деформации, ориентированных на фрагментацию зеренной структуры.....	23
1.1. Экспериментальные исследования и взгляд с позиций физики твердого тела.....	24
1.2. Математические модели материалов, включающие описание фрагментации зеренной структуры	29
1.3. Развитие описания процесса фрагментации зеренной структуры: иерархия моделей	45
2. Базовая двухуровневая статистическая конститутивная модель для описания неупругого деформирования поликристаллических металлов	52
2.1. Концептуальная постановка задачи описания деформирования представительного объема поликристаллического металла с использованием базовой двухуровневой конститутивной модели	52
2.2. Математическая постановка задачи описания деформирования представительного объема поликристаллического металла с использованием базовой двухуровневой конститутивной модели	56
2.3. Анализ результатов оценки устойчивости модели к возмущениям входных данных и параметров оператора.....	61
2.4. Анализ результатов моделирования нагружений с изломом траектории деформации.....	75
3. Интеграция в базовую двухуровневую конститутивную модель модифицированной подмодели для приближенного описания фрагментации зерен.....	89

3.1. Описание концепции, базовых и модифицированных соотношений модели ETMB.....	90
3.2. Результаты совместного использования конститутивной модели и модифицированной модели ETMB для описания эволюции среднего размера ячейки при равноканальном угловом прессовании.....	99
3.3. Применение модели для описания измельчения зерен при холодной гибке листа стали 08X18H10	105
4. Новая многоуровневая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики с учетом ключевых механизмов фрагментации зерен	112
4.1. Структура модели для описания фрагментации зерен на базе континуальной дислокационной динамики	113
4.2. Результаты применения многоуровневой конститутивной модели на базе континуальной дислокационной динамики для описания равноканального углового прессования меди	125
Заключение.....	132
Литература	134
Приложение.....	160

Сокращения

ВДС – внутризеренное дислокационное скольжение

ВП – внутренние переменные

ГНГ – геометрически необходимые границы

ГНД – геометрически необходимые дислокации

ГПУ решетка – гексагональная плотноупакованная решетка

ГЦК решетка – гранецентрированная кубическая решетка

ДМ – дислокационная модель

ИПД – интенсивные пластические деформации

ИТН – изображающая точка в пространстве напряжений

КМ – конститутивные модели

ЛСК – лабораторная система координат

МКЭ – метод конечных элементов

НДС – напряженно-деформированное состояние

НП – направление прокатки

ОМД – обработка металлов давлением

ОЦК решетка – объемноцентрированная кубическая решетка

ПН – перпендикулярное направление

ПО – представительный объем

ПрМ – прямая модель

ПСК – подвижная система координат

ПТ – поверхность текучести

РКУП – равноканальное угловое прессование

СНД – статистические накопленные дислокации

СС – системы скольжения

ФТП – физические теории пластичности

ЭДУ – энергия дефекта упаковки

ETMB (модель) – модель Y. Estrin, L.S. Toth, A. Molinari, Y. Brechet

Основные обозначения

$\mathbf{K}$ (κ) – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа макроуровня (мезоуровня)

$\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши мезоуровня

$\mathbf{p}_{(cor)}$ – тензор упругих свойств кристаллита, компоненты которого постоянны в подвижной системе координат

$\mathbf{z}_e, \mathbf{z}_{in}$ – мера скорости упругой и неупругой составляющей деформации

$\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T(t) (\mathbf{I} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T(t))$ – транспонированный градиент скорости перемещений макроуровня (мезоуровня)

$\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона в актуальной конфигурации

$\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения (в актуальной конфигурации) краевых дислокаций для системы скольжения k

$\dot{\gamma}^{(k)}, \tau^{(k)}, \tau_c^{(k)}$ – скорость сдвига, касательное и критическое касательное напряжение по системе скольжения k

$\mathbf{b}_{tw}^{(s)}, \mathbf{n}_{tw}^{(s)}$ – единичные векторы направления двойникового сдвига и нормали к плоскости двойникового сдвига (в актуальной конфигурации) на системе двойникования s

$\dot{\gamma}_{tw}^{(s)}, \tau_{tw}^{(s)}, \tau_{twc}^{(s)}$ – скорость двойникового сдвига, касательное и критическое касательное напряжение для системы двойникования s

$\mathbf{o}, \boldsymbol{\omega}$ – ориентация подвижной системы координат относительно лабораторной системы координат и спин подвижной системы координат

l – средний размер ячейки

ρ_c, ρ_w, ρ – плотность дислокаций во внутренности ячейки, стенках ячейки, суммарная

f – объемная доля стенок

$\rho_{SSD}^{(k)}, \rho_{GND}^{(k)}$ – плотность статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций на системе скольжения k

$\rho_m^{(k)}, \rho_{im}^{(k)}$ – плотность подвижных и неподвижных дислокаций на системе скольжения k

$d^{(k)}$ – средняя длина свободного пробега на системе скольжения k

d_f, θ – размер и угол разориентации фрагментов

S_f, S_g – удельная площадь (на единицу объема) границ фрагментов и границ зерен

$\bar{d}_f, d_g$ – средний размер фрагментов и средний размер зерна в представительном объеме

$\sigma_M (\varepsilon_M)$ – интенсивность напряжений (интенсивность накопленных деформаций)

$\langle \cdot \rangle$ – обозначение операции осреднения

$H(\cdot)$ – функция Хэвисайда

Введение

Сегодня математическое моделирование является важнейшей составляющей проектирования технологических процессов. При этом в связи с развитием вычислительной техники появляется возможность предлагать лучшие варианты их реализации на основе детализированных моделей материалов. Работа посвящена развитию аппарата многоуровневых конститутивных моделей металлов и сплавов, позволяющих совершенствовать процессы изготовления промышленных деталей и конструкций методами обработки металлов давлением (ОМД), а также методами так называемой интенсивной пластической деформации (ИПД).

При изготовлении деталей и конструкций основная масса (~90 %) производимого металла подвергается обработке давлением, включающей такие популярные методы, как прокатка, ковка, объемная и листовая штамповка, прессование, волочение и другие [1,2]. При реализации процессов обработки металлов давлением происходит формирование требуемой формы изделий и необходимых для их дальнейшей эксплуатации физико-механических свойств [1,2]. Преимуществами ОМД по сравнению с другими подходами к производству деталей (например, литье, обработка металлов резанием, использование аддитивных технологий) являются высокая производительность, малоотходность, наличие ровной поверхности и высокой точности размеров у получаемых изделий, отсутствие остаточных напряжений и таких дефектов, как поры и неметаллические включения [1].

В ходе ОМД происходит перестроение структуры материала, в частности, при пластическом деформировании происходит наклеп, фрагментация зеренной структуры, рекристаллизация, твердотельные фазовые превращения и другие. В последние десятилетия интенсивно развиваются основанные на этом свойстве процессы ОМД с применением интенсивной пластической деформации, позволяющие получать материалы и изделия с значительно улучшенными эксплуатационными свойствами без существенного изменения формы заготовки.

На сегодняшний день разработано множество процессов ИПД, наиболее популярными из них являются равноканальное угловое прессование (РКУП) [3,4], кручение под высоким давлением [5,6], обкатка роликами [7,8], многонаправленная штамповка [9], ротационное обжатие [10] и другие. Основным отличием процессов ИПД от классических ОМД является высокая стесненность детали при обработке, что позволяет проводить деформирование до нескольких сотен и тысяч процентов без разрушения [11,12]. Отметим, что по сравнению с другими процессами ИПД РКУП обладает рядом преимуществ [4]. В частности, данный метод может применяться для довольно больших заготовок, что обуславливает возможность его использования в качестве начального этапа в многоэтапных процессах при создании конструкций в широком диапазоне их размеров. Во-вторых, РКУП может применяться для широкого диапазона материалов с различной кристаллической структурой (чистых металлов, сплавов и даже композитов). В-третьих, в ходе РКУП используется довольно простая технологическая установка. Наконец, в-четвертых, после обработки РКУП материал имеет примерно однородную равноосную мелкозернистую структуру зерен [13,14]. Подробный обзор по методам ИПД приведен в работах [11,12,15].

При пластическом деформировании основным реализующимся механизмом является внутризеренное дислокационное скольжение (ВДС) [16–18]. При скольжении по наиболее плотноупакованным плоскостям в направлении плотнейшей упаковки (системам скольжения (СС)) дислокации могут вступать в реакции между собой, образуя низкоэнергетические конфигурации [19,20]. В ходе процессов ИПД происходит существенное изменение дислокационной субструктуры, при этом реализуются процессы генерации дислокаций [16,17], аннигиляции [16], образования барьеров [16,18], возврата [18,21], переползания дислокаций [16,22,23] и другие. При неупругом деформировании металлов и сплавов методами ИПД за счет вышеуказанных процессов эволюции дефектной структуры активно реализуются процессы фрагментации и рекристаллизации, приводящие к существенному изменению размеров зерен материала.

При повышенных гомологических температурах (выше 0.5) изменение зеренной структуры происходит в основном за счет статической или, при деформировании, динамической рекристаллизации, которые обусловлены диффузионными процессами (в частности, возвратом, миграцией мало- и большеугловых границ) в материале [24,25]. Процесс рекристаллизации заключается в зарождении и эволюции новых менее дефектных зерен за счет поглощения старых более дефектных соседних зерен [25,26]. Движущей силой рекристаллизации является разность запасенных на дефектах энергий субзерен в соседних зернах [27–29]. Анализ процесса рекристаллизации является актуальным для создания функциональных материалов-конструкций в ходе сложных технологических процессов термомеханической обработки, в которых требуется учет внутренней структуры материала [27,30]. Отметим, что в диссертационной работе происходящие при повышенных температурах механизмы деформирования не рассматриваются, то есть процесс рекристаллизации остается за рамками исследования, но в то же время предлагаемые в работе соотношения в перспективе будут являться основой для соответствующей части модели поведения материала и при повышенных температурах.

При гомологических температурах существенно ниже 0.5 (в частности, при комнатной температуре) доминирующим механизмом изменения зеренной структуры при ИПД является фрагментация (измельчение), вызванная взаимодействием дислокаций друг с другом и формированием внутри крупных зерен множества блоков ячеек с постепенной их эволюцией в процессе деформирования сначала в субзеренную, а затем в новую мелкозернистую структуру за счет разворотов частей зерна друг относительно друга [19,24,31]. При фрагментации реализуется уменьшение размеров зерен на мезоуровне, которое приводит к улучшению эксплуатационных физико-механических характеристик готового изделия на макроуровне. В материалах с мелким размером зерна повышается прочность, твердость, улучшаются усталостные

свойства, электропроводность, магнитные свойства и др. [32]. Изделия из материалов с мелким размером зерна при низких скоростях деформации и повышенных температурах способны деформироваться в режиме сверхпластичности [32,33]. Углубленное понимание реализующихся на мезоуровне механизмов деформирования в ходе фрагментации и управление ими с целью получения изделий с требуемыми эксплуатационными характеристиками является актуальной задачей для совершенствования технологических процессов обработки металлов. Предметом исследования в работе являются технологические процессы обработки металлов при низких гомологических температурах, в ходе которых реализуется процесс фрагментации их зеренной структуры за счет указанных выше механизмов деформирования. Объектом исследования являются поликристаллические металлы с гранецентрированной кубической (ГЦК) решеткой.

На сегодняшний день в литературе представлено множество экспериментальных работ, исследующих процесс измельчения зеренной структуры. Существенный вклад в описание процесса измельчения с экспериментальной точки зрения внесли работы Р.З. Валиева, Р.О. Кайбышева, Э.В. Козлова, Н.А. Коневой, В.Е. Панина, В.В. Рыбина, С.Y.J. Barlow, В. Bay, Y. Estrin, N. Hansen, D. Kuhlmann-Wilsdorf, Н. Mughrabi, T.Sakai [19,25,32,34–41] и других. Экспериментальные данные свидетельствуют о том, что процесс измельчения существенно зависит от типа решетки. Для металлов и сплавов с объемноцентрированной кубической (ОЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) решетками активным механизмом деформирования, реализующим процесс измельчения, наряду с внутризерненным дислокационным скольжением является двойникование. Для ГЦК-металлов реализация процесса измельчения зависит от величины энергии дефекта упаковки (ЭДУ): при высокой и средней ЭДУ процесс измельчения реализуется за счет эволюции блочно-ячеистой структуры, а при низкой ЭДУ дополнительным механизмом деформирования, аналогично ОЦК- и ГПУ-металлам, выступает двойникование.

В последние десятилетия с развитием средств вычислительной техники применение аппарата математического моделирования позволяет все более детально прогнозировать реальные технологических процессы [42]. При математическом описании поведения материала в ходе деформирования используют конститутивные модели (определяющие соотношения). В подавляющем большинстве работ используются макрофеноменологические определяющие соотношения, и большой прогресс индустрии XX века связан с эффективным применением таких моделей в совокупности с методом конечных элементов [43,44], что позволило с высокой степенью адекватности определять напряженно-деформированное состояние (НДС) материала, остаточные напряжения первого рода, силовые параметры установки и другие интегральные характеристики. Однако в макрофеноменологических моделях отсутствует возможность явным образом описать эволюцию структуры материала, которая определяет эксплуатационные характеристики изделий. Следовательно, для применения таких моделей при проектировании новых технологических процессов, в которых может реализоваться широкий спектр воздействий, для учета различных видов нагружений (траекторий деформирования) необходимо вводить непосредственную аппроксимацию большого набора экспериментальных данных при разных условиях, что крайне ресурсоемко. Поэтому в последние десятилетия развиваются основанные на физических теориях пластичности (ФТП) многоуровневые модели (в зарубежной литературе принят термин «crystal plasticity models») [30,42,45]. Основным преимуществом многоуровневых моделей перед макрофеноменологическими является возможность явным образом учесть элементы внутренней структуры материала и реализующиеся на различных структурно-масштабных уровнях механизмы деформирования за счет введения внутренних переменных (ВП) [46,47]. Существенный вклад в развитие аппарата многоуровневого моделирования в РФ внесли работы А.Е. Волкова, В.А. Лихачева, В.Г. Малинина, механиков томской научной школы В.Е. Панина (Р.Р. Балохонов, П.В. Макаров, А.В. Панин, С.В. Панин, В.А. Романова, А.Ю.

Смолин, И.Ю. Смолин и другие), В.В. Рыбина, уральской школы механиков, основанной С.Д. Волковым (Ю.В. Соколкин, А.А. Ташкинов, В.Э. Вильдеман и др.), А.С. Семенова [19,48–56] и других. Стоит отметить, что многоуровневые модели металлов и сплавов, как правило, формулируются на основе физических соотношений для описания процессов на мезоуровне (в ряде работ – с привлечением микро- и атомарного уровней). Значительный вклад в развитие таких соотношений внесен в работах А.В. Вахрушева, М.Д. Кривилева, А.М. Кривцова, М.Д. Мышлявцевой, С.Г. Псахье [57–61] и других.

Аппарат многоуровневых конститутивных моделей интенсивно развивается в Пермском Политехе на кафедре математического моделирования систем и процессов под общим руководством П.В. Трусова. К настоящему моменту в коллективе разработан общий подход к построению многоуровневых конститутивных моделей для описания деформирования поликристаллических металлов и сплавов с использованием физически обоснованной формулировки геометрически нелинейных определяющих соотношений [62,63], в которых в качестве основных механизмов деформирования учитываются внутризеренное дислокационное скольжение (включая различные механизмы упрочнения) [64,65], ротации кристаллических решеток [66,67], двойникование [68]. Предложены варианты модели для описания зернограницного скольжения [69], динамической рекристаллизации [28,29,70], деформирования сплавов в режиме сверхпластичности и переходов к нему [33]. Разработаны алгоритмы реализации перечисленных моделей при решении краевых задач с помощью метода конечных элементов [71,72]. Более подробно с основными результатами по развитию методологии многоуровневого моделирования можно ознакомиться в объемной монографии [30] и научных статьях коллектива.

Многоуровневые конститутивные модели (КМ) в зависимости от гипотезы о связи переменных на соседних уровнях подразделяются на три группы: прямые (в зарубежной литературе – «crystal plasticity finite element models») [42,73], статистические (в зарубежной литературе – «Taylor models») [74] и

самосогласованные (в зарубежной литературе – «self-consistent models») [42,75]. Заметим, что статистические модели являются наиболее вычислительно эффективными и позволяют с достаточной степенью адекватности описывать технологические процессы обработки металлов.

В соответствии с приведенной выше аргументацией важным направлением развития аппарата многоуровневых КМ является разработка и интеграция в них корректных соотношений для учета различных механизмов деформирования, в частности, фрагментации. Такие расширенные КМ могут применяться для описания и совершенствования реальных технологических процессов ОМД и ИПД, а также для решения задачи функционального проектирования изделий из металлов и сплавов, в рамках которой определяется их оптимальная структура при функционировании [76]. При этом при построении многоуровневых КМ целесообразно использовать положения физически-ориентированных моделей фрагментации (Е.А. Ржавцев, М.Ю. Гуткин, А.В. Шутов, Y. Beygelzimer, S.C. Cao, Y. Estrin, J. Majta, H. Petryk, S. Stupkiewicz, L.S. Toth, A.P. Zhilyaev и другие) [37,77–84]. К настоящему моменту предложены построенные в такой логике многоуровневые конститутивные модели с включенным описанием фрагментации, например, в работах Т.С. Орловой, А.А. Назарова, Н.А. Еникеева, K. Frydrych, K. Kowalczyk-Gajewska, A.H. Kobaissy, O. Rezvanian, M. Seefeldt и других [85–92]. Однако в ходе аналитического обзора литературы не удалось найти исследований, в которых процесс фрагментации моделируется в рамках многоуровневого подхода с комплексным учетом изменения всех ключевых характеристик структуры материала – размеров зерен, субзерен, их разориентации и эволюции плотностей дислокаций в них; исследователи дают упрощенное модельное описание реальной сложной физики процесса. Автором найдено лишь несколько работ, в которых процесс фрагментации описывается на двух структурных уровнях – уровне зерен/блоков ячеек и уровне блоков ячеек/субзерен/ячеек [78,89]. В большинстве разработанных моделей рассматривается эволюция либо размера зерна при деформировании без явного

учета эволюции более мелких структурных элементов [91,92], либо размера отдельных ячеек/блоков ячеек/субзерен с применением гипотезы о соответствии последнего среднему размеру зерна при очень больших деформациях [37,82,83,87,93]. Некоторые модели построены в алгоритмическом ключе с большой ресурсоемкостью для реализации попытки явного учета генерации новых зерен и механизмов трансформации [91,92].

Таким образом, можно сделать вывод о том, что существующие модели фрагментации зачастую с недостаточной углубленностью учитывают физические механизмы процесса измельчения. При этом имеющиеся детализированные КМ вычислительно не эффективны и в то же время используют упрощенные описания некоторых механизмов деформирования, что делает модели не универсальными. Сказанное обуславливает высокую степень актуальности тематики диссертационной работы и ее значительную научную новизну.

Цель работы – создание многоуровневой статистической конститутивной модели для описания изменения напряженно-деформированного состояния и процесса фрагментации зеренной структуры металлов в ходе процессов обработки давлением при низких гомологических температурах. Указанная модель должна с детальностью, достаточной для углубленного моделирования технологических процессов обработки металлов, описывать физические процессы измельчения зерен при деформировании (изменения плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, значений среднего размера фрагментов и зерен, углов разориентации фрагментов), обладая при этом вычислительной эффективностью, позволяющей за приемлемое время моделировать поведение материала при реализации процессов ОМД и ИПД.

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

1. Провести аналитический обзор экспериментальных и теоретических исследований процесса измельчения зеренной структуры для систематизации данных о физических особенностях изменения структуры, основных механизмах фрагментации и установления актуальных направлений для развития существующих математических моделей.
2. Проверить адекватность базовой двухуровневой статистической конститутивной модели путем сопоставления с экспериментальными данными, а также провести анализ устойчивости к возмущениям различной природы и оценку применимости для описания нагружений с резко изменяющейся траекторией деформации.
3. Интегрировать в базовую двухуровневую статистическую конститутивную модель известную подмодель ЕТМВ для приближенного описания процесса измельчения, провести её модификацию для более адекватного описания фрагментации.
4. На базе континуальной дислокационной динамики разработать собственную модификацию модели фрагментации для комплексного и корректного учета всех значимых механизмов деформирования, реализующихся в процессе измельчения. Интегрировать разработанную модель фрагментации в структуру базовой двухуровневой статистической конститутивной модели.
5. Разработать алгоритмы численной реализации сформулированных согласно п. 3 и п. 4 моделей, создать программы для ЭВМ.
6. Реализовать процедуры идентификации и верификации созданных моделей для простых и сложных нагружений, в ходе которых провести анализ изменения напряженно-деформированного состояния и структуры материала.

Методология и методы исследования. Методологической базой диссертации являются работы отечественных и зарубежных исследователей в

области математического моделирования сложных систем, нелинейной механики и физики деформируемого твердого тела. Информационную основу составляют статьи в периодических изданиях и научных сборниках, монографии и справочная литература по исследуемой тематике.

В работе используются методы многоуровневого подхода к построению математических моделей поведения материалов: декомпозиция, введение внутренних переменных для описания элементов структуры и механизмов деформирования, формулировка соотношений для их кинетики на базе физики твердого тела и термодинамики, синтезирование. Алгоритмы реализации моделей построены на базе численных методов интегрирования систем дифференциальных уравнений, решения систем нелинейных алгебраических уравнений, численных методов оптимизации.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Для базовой двухуровневой статистической конститутивной модели проведен анализ устойчивости к возмущениям начальных условий, воздействий и параметрам оператора. С её применением адекватно описаны сложные нагружения с изломом траектории деформации.
2. В базовую двухуровневую статистическую конститутивную модель впервые интегрирована известная подмодель для приближенного описания процесса измельчения; проведена её модификация.
3. Предложена новая многоуровневая статистическая конститутивная модель для описания изменения напряженно-деформированного состояния и фрагментации зеренной структуры ГЦК-металлов при низких гомологических температурах. В модели учитываются дислокационные процессы внутри фрагментов и в их границе, развороты фрагментов, эволюция средних размеров фрагментов и зерен.
4. Сформулированы алгоритмы реализации разработанных моделей с использованием эффективных численных методов. Написаны

программы для ЭВМ, реализующие созданные модели с использованием предложенных алгоритмов.

5. Получены и проанализированы новые результаты моделирования деформирования материалов при обработке давлением с детализированным описанием действующих при фрагментации зерен механизмов деформирования.

Содержание приведенных выше п. 2 и п. 3 составляет основную теоретическую значимость работы.

Практическая значимость работы заключается в возможности использования созданных моделей и комплекса программ для описания технологических процессов ОМД и ИПД промышленных металлов, что позволит за счет анализа структуры и реализации механизмов деформирования разрабатывать рекомендации по их совершенствованию. Получены два свидетельства о регистрации программы для ЭВМ № 2024668653 от 09 августа 2024 г. [94] и № 2024691996 от 25 декабря 2024 г. [95].

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Базовая двухуровневая статистическая конститутивная модель является устойчивой к возмущениям входных данных и параметров оператора, адекватно описывает нагружения с изломом траектории деформации.
2. Создана новая статистическая конститутивная модель на основе базовой двухуровневой с интегрированной модификацией известной подмодели фрагментации, которая позволяет приближенно описать процесс измельчения.
3. Создана новая многоуровневая статистическая конститутивная модель с подмоделью фрагментации, в которой вводится совокупность соотношений для учета эволюции плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, размера и угла разориентации фрагментов, размера зерна. Модель позволяет

углубленно описать процесс измельчения зерен ГЦК-металла при низких гомологических температурах.

Достоверность и обоснованность результатов подтверждается удовлетворительным соответствием результатов численного моделирования данным натурных экспериментов для простых и сложных нагружений, в том числе – по характеристикам микроструктуры материала (текстурам, плотностям дислокаций, углам разориентации фрагментов и средним размерам ячеек, фрагментов, зерен), результатами численной оценки устойчивости и сходимости модели.

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались на конференциях: XXX–XXXIII Всероссийских школах-конференциях «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, ПНИПУ, 2021–2024); XV–XVIII международной конференции «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2021–2024); конференции «Механика деформируемого твердого тела в проектировании конструкций» (Пермь, 2022); XXIII и XXIV Зимних школах по механике сплошных сред (Пермь, 2023, 2025); международных конференциях «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск, 2023, 2024); X всероссийской конференции «Лаврентьевские чтения по математике, механике и физике» (Новосибирск, 2025). Работа полностью докладывалась и обсуждалась на семинарах кафедры математического моделирования систем и процессов ПНИПУ (руководитель – д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусков), Института механики сплошных сред УрО РАН (руководитель – академик РАН, д.т.н., проф. В.П. Матвеев), кафедры экспериментальной механики и конструкционного материаловедения ПНИПУ (руководитель – д.ф.-м.н., проф. В.Э. Вильдеман).

Публикации. Результаты исследования по теме диссертации изложены в 26 научных работах, в том числе 7 статей в ведущих журналах, из которых 5

публикаций – в изданиях, индексируемых в международных базах цитирования Web of Science и/или Scopus, 2 статьи в ведущих рецензируемых изданиях из перечня ВАК; получены 2 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Личный вклад автора. Все представленные в диссертации результаты получены при личном участии автора (совместно с научным руководителем): постановка задачи, построение математических моделей и разработка алгоритмов их численной реализации; вычислительные эксперименты и анализ полученных результатов выполнены автором лично.

Связь исследований с научными программами. Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проекты № FSNM-2021-0012, № FSNM-2024-0002.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, списка сокращений и основных обозначений, 4 глав, заключения, списка использованной литературы. Работа изложена на 160 страницах, содержит 27 рисунков, 8 таблиц. Список литературы включает 237 наименований.

Благодарности: Автор благодарит за помощь и поддержку при подготовке работы научного руководителя д.ф.-м.н., доц. А.И. Швейкина, д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусова, к.ф.-м.н. Н.С. Кондратьева, а также весь коллектив кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» и лаборатории «Многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов» Пермского национального исследовательского политехнического университета.

Краткое содержание работы

Введение содержит обоснование актуальности исследуемой тематики и характеристику степени её разработанности в науке на текущий момент. Сформулированы цель и задачи диссертационной работы; приведены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, методологические аспекты и методы исследования, положения, выносимые на защиту; указана информация о степени достоверности и апробации результатов. Представлено краткое содержание диссертации по главам.

Первая глава посвящена аналитическому обзору публикаций.

В п. 1.1 приведены результаты обзора экспериментальных исследований процесса фрагментации для различных материалов и условий нагружений, в ходе которого проведен анализ особенностей эволюции структуры материала и реализации механизмов деформирования в исследуемом процессе.

В п. 1.2 рассмотрены существующие модели для описания фрагментации, которые можно разделить на классы: макрофеноменологические, континуальные и многоуровневые физически-ориентированные модели. Обосновано, что в связи со значительным изменением внутренней структуры в ходе процесса измельчения для его описания целесообразно использовать последний тип моделей.

На основе результатов обзора установлено актуальное направление развития моделирования процесса фрагментации зеренной структуры. В п. 1.3 концептуально описана иерархия моделей для движения по данному направлению. Приведено описание структур моделей фрагментации, позволяющих пошагово подойти к построению целевой модели на основе дислокационного описания, интегрируемой в двухуровневую конститутивную модель. Первой рассмотренной моделью является наиболее детализированная (но ресурсоемкая) прямая модель, второй – менее детализированная (но численно эффективная) модель (модификация модели ETMB (Y. Estrin, L.S. Toth, A. Molinari, Y. Brechet)). Приведено обоснование необходимости построения

новой физически детальной и вычислительно эффективной многоуровневой конститутивной модели для комплексного описания измельчения.

Во **второй главе** приводится описание базовой двухуровневой статистической конститутивной модели.

В п. 2.1 содержатся положения концептуальной постановки: принимаемые гипотезы, требования и ограничения модели. Приводится структура модели, содержащая описание определяющих соотношений, эволюционных и замыкающих уравнений.

В п. 2.2 представлена математическая постановка задачи описания неупругого деформирования представительного объема поликристаллических металлов, включающая соотношения мезоуровня и начальные условия. Кратко описан алгоритм численной реализации модели.

В п. 2.3 проанализированы полученные результаты оценки устойчивости модели к возмущениям различной природы.

В п. 2.4 приведены результаты анализа по применению базовой конститутивной модели для описания нагружений с изломом траектории деформирования.

В **третьей главе** содержится описание соотношений подмодели ЕТМВ для приближенного учета реализующихся в ходе фрагментации изменений структуры. Предложены модификации базовых соотношений для более адекватного описания процесса измельчения в ходе ИПД. Приведены результаты применения модели и их анализ для различных технологических процессов. При этом в ходе обзора литературы не было найдено работ с совместным применением многоуровневых КМ и модели ЕТМВ, что свидетельствует о новизне представленной в диссертации постановки КМ с интегрированной модификацией модели ЕТМВ и полученных с её помощью результатов.

В п. 3.1 приводится структура базовой модели ЕТМВ для описания измельчения зерен и её модификация с использованием известных из литературы соотношений.

В п. 3.2 приведены полученные с помощью КМ с модифицированной подмоделью ETMB результаты расчета четырех проходов равноканального углового прессования меди по маршруту В_с (с поворотами заготовки между проходами на 90° по часовой стрелке вокруг продольной оси образца) при комнатной температуре.

В п. 3.3 приведен анализ результатов моделирования холодной гибки листа стали 08X18H10 (близкий зарубежный аналог AISI 304), полученных с использованием коммерческого пакета конечно-элементного анализа и разработанной двухуровневой статистической КМ с модифицированной подмоделью ETMB для описания измельчения зерен.

В четвертой главе приводится дислокационная модель (ДМ) фрагментации на базе континуальной дислокационной динамики для углубленного описания процесса измельчения. ДМ сформулирована на основе детального анализа физических представлений о процессе фрагментации и ранее разработанной модификации модели ETMB для приближенного описания измельчения.

В п. 4.1 подробно описана структура ДМ, в которой комплексно учитываются изменение плотности статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, размера и угла разориентации фрагментов, размера зерна. В диссертационной работе впервые представлена единая постановка с учетом известных из различных литературных источников соотношений для описания эволюции указанных характеристик внутренней структуры.

В п. 4.2 приведены результаты моделирования РКУП меди по маршруту В_с при комнатной температуре, полученные с использованием КМ с интегрированной дислокационной моделью для комплексного описания фрагментации.

В заключении суммированы основные выводы по работе.

1. Анализ современного состояния в области исследования процессов термомеханической обработки методами интенсивной пластической деформации, ориентированных на фрагментацию зеренной структуры

В данной главе приводятся результаты аналитического обзора экспериментальных материаловедческих исследований процесса фрагментации при термомеханической обработке металлов и сплавов и предложенных к настоящему моменту моделей для его описания. На основе результатов обзора установлено актуальное направление развития подходов к моделированию процесса фрагментации зеренной структуры в рамках многоуровневых конститутивных моделей; в последнем разделе главы концептуально описана иерархия моделей фрагментации, предложенных в работе для движения по данному направлению.

Как отмечено во введении, в диссертации рассматривается процесс фрагментации при низких гомологических температурах, который описывается эволюцией блочно-ячеистой структуры. В то же время предлагаемые в работе соотношения в перспективе могут являться основой для описания поведения материала и при повышенных температурах. Рассмотренные далее особенности процесса фрагментации характерны для процессов ОМД, в том числе с применением ИПД. Заметим, что для ОМД свойственны умеренные накопленные деформации, при которых, в отличие от ИПД процессов с накопленными деформациями порядка сотен и тысяч процентов, необходимо описывать процесс фрагментации на нескольких структурно-масштабных уровнях. При моделировании процесса фрагментации в рамках ИПД исследователями зачастую описывается эволюция одного структурного параметра (размера ячеек, субзерен) и применяется гипотеза о сопоставлении его среднему размеру зерна при больших деформациях. В диссертации предлагается совокупность уравнений, которые комплексно описывают измельчение зерен с учетом эволюции размера фрагмента и размера зерна.

1.1. Экспериментальные исследования и взгляд с позиций физики твердого тела

В экспериментальных работах по анализу микроструктуры материала при разнообразных ИПД процессах отмечается, что в материалах с различным типом решетки (ГЦК, ОЦК, ГПУ) процесс измельчения зерен происходит по-разному [19,31]. Для материалов с ГЦК решеткой процесс фрагментации зерен зависит от значения энергии дефекта упаковки. Отметим, что на ЭДУ материала существенно влияют примеси [96]. В работах [19,31] на основе рассмотрения большого количества экспериментальных работ подробно описывается эволюция микроструктуры ГЦК-металлов при высокой, средней и низкой ЭДУ.

Для материалов с высокой ЭДУ (например, алюминий, никель) процесс измельчения можно описать следующим образом. На начальных стадиях пластического деформирования равномерное распределение дислокаций в зерне поликристалла становится энергетически невыгодным, поэтому дислокации начинают формировать различные дислокационные структуры [14,34–36,97]. При высоких значениях ЭДУ основным механизмом деформирования в крупнозернистых материалах является дислокационное скольжение, вследствие которого преимущественно формируется ячеистая структура [19,31,36]. В [31] отмечается, что в процессе измельчения ГЦК-материалов с высокой ЭДУ выделяется пять стадий (рисунок 1.1). Аналогичное описание процесса приведено в [14].

При описании процесса измельчения с материаловедческой точки зрения, а также для дальнейшего построения моделей введем термины согласно [36,40]. *Ячейка* – примерно равноосный объемный элемент, внутри которого плотность дислокаций мала и который отделен от других ячеек «толстыми» малоугловыми случайными дислокационными границами. *Блок ячеек* – совокупность близлежащих ячеек, имеющих одинаковый набор активных систем скольжения; блоки отделены друг от друга малоугловыми геометрически необходимыми дислокационными границами, причем разориентация блоков между собой

больше, чем разориентация отдельных ячеек в блоке. *Субзерно* – объем материала, для которого разориентация между ним и его окружением становится больше, чем для блоков ячеек. Границы между субзернами являются геометрически необходимыми границами, но они тоньше, чем границы между блоками ячеек, при этом разориентация между субзернами больше, чем разориентация между блоками – приближаясь к характерной для большеугловых границ. Внутри субзерна могут присутствовать малоугловые границы, которые по структуре близки к границам ячеек и трансформируются с ростом деформации в геометрически необходимые границы. Таким образом, субзернами являются либо блоки ячеек, либо отдельные ячейки с высокой разориентацией с окружением (соседними блоками и соседними ячейками соответственно). *Зерно* – объемный элемент материала, отделенный от других зерен большеугловыми границами. *Фрагмент* – объем материала, который отделен от других фрагментов малоугловыми геометрически необходимыми дислокационными границами, то есть при моделировании процесса фрагментации в зависимости от стадии деформирования фрагменту соответствует либо блок ячеек, либо субзерно [36,40].

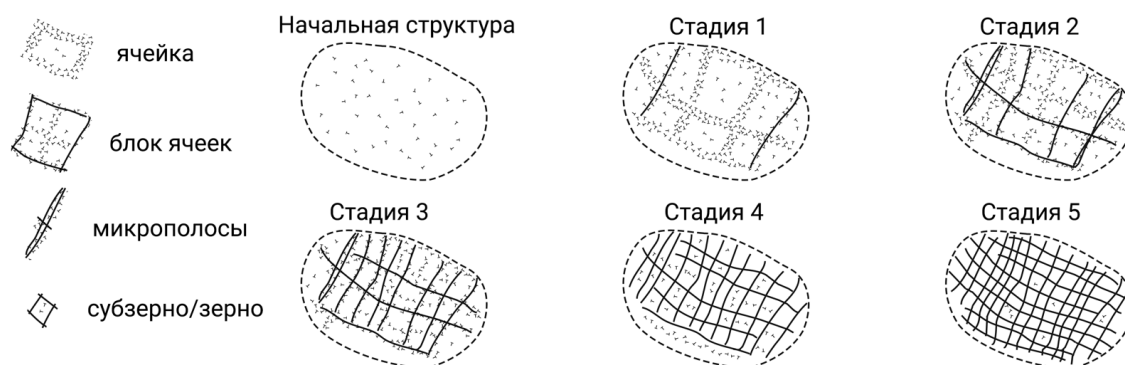


Рисунок 1.1. Схематичное представление пяти стадий процесса измельчения согласно [31]:
символы «т» – дислокации, сплошные линии – геометрически необходимые границы

На первой стадии (на начальных этапах деформирования) зерна разделяются на блоки ячеек, ограниченные плотными дислокационными стенками (обозначены на рисунке 1.1 сплошными линиями) [36,98]. Под «плотностью» стенок подразумевается плотность дислокаций в них, то есть

плотные дислокационные стенки – это узкие дислокационные стенки с высокой локальной плотностью дислокаций [36]. Такие стенки являются геометрически необходимыми границами (ГНГ), так как разделяют области, разориентация которых вызвана поворотами решетки из-за различного набора активных систем скольжения в них [36,98]. Дислокации могут приходить из внутренности блока ячеек и вступать в реакции с дислокациями в ГНГ, увеличивая тем самым разориентацию блоков друг относительно друга [40]. Блоки ячеек состоят из отдельных ячеек, внутренности которых практически свободны от дислокаций и разделенных стенками (менее плотными по сравнению с ГНГ), которые являются случайными дислокационными границами, так как они формируются в результате торможения краевых дислокаций на препятствиях различной природы, включая дислокации леса [36,98]. Случайные дислокационные границы не являются геометрически необходимыми, так как разделяют области (ячейки), одинаковые по набору активных систем скольжения. Процесс образования таких стенок (и, соответственно, новых ячеек) обусловлен значительным повышением плотности дислокаций в блоках ячеек за счет генерации дислокаций источниками Франка-Рида. В работах [34,99–101] отмечается, что ячейки должны образовывать блочную структуру, быть примерно одинакового размера, иметь форму параллелепипеда и вращаться вокруг одной оси на один и тот же угол, но в противоположных направлениях. Согласно численным расчетам [99,100], именно такая конфигурация ячеек доставляет минимум свободной энергии.

При увеличении деформации, на второй стадии, повышается разориентация между отдельными ячейками и между блоками ячеек. При этом стенки ячеек могут трансформироваться в ГНГ, а плотные дислокационные стенки, в свою очередь, могут разделяться на почти параллельные стенки, образуя так называемые микрополосы [19,36,102] (на рисунке 1.1 микрополосы обозначены двойными линиями). Существенно увеличенное по сравнению с первой стадией

(за счет выделения отдельных ячеек в самостоятельные блоки) количество блоков и микрополос является особенностью второй стадии.

На третьей стадии в результате уменьшения размера блоков ячеек (опять же в результате процесса трансформации отдельных ячеек в самостоятельные блоки) и увеличения углов разориентации между ними образуются вытянутые субзерна, разориентация которых существенно больше, чем разориентация блоков ячеек. Плоскости границ таких субзерен практически параллельны направлению сдвига [102]. Во внутренностях субзерен образуются пересекающие их границы, которые являются «толстыми» стенками дислокаций.

На четвертой стадии при увеличении деформации увеличивается число субзерен из-за продолжающейся разориентации отдельных ячеек и трансформации микрополос в субзерна. В то же время пересекающие субзерна границы становятся тоньше из-за аннигиляции дислокаций в них. Таким образом, разориентация областей, ограниченных ими, возрастает, что приводит к уменьшению размеров субзерен и формированию некоторой доли равноосных зерен.

На пятой стадии происходит дальнейшая разориентация субзерен до тех пор, пока зеренная структура не достигнет стадии насыщения, при которой большая часть зерен становится равноосной. При этом дальнейшее увеличение деформации не приводит к изменению структуры отдельных зерен. Таким образом, на данной стадии размеры отдельных зерен не меняются, что свидетельствует о достижении предельного размера зерна.

Для ГЦК-материалов со средней ЭДУ при обычных условиях деформирования (низкие скорости деформирования, низкое давление, комнатная температура) процесс измельчения практически не отличается от описанного выше для материалов с высокой ЭДУ [31]. Однако при большом давлении (например, при кручении с давлением) после полученной ультрамелкозернистой структуры (стадии получения которой описаны выше) возможен переход к нанокристаллической структуре, содержащей большое количество двойников.

Таким образом, при определенных условиях в материалах со средней ЭДУ наблюдается активация еще одного механизма деформирования – двойникования [31,40].

Деформирование материалов с низкой величиной ЭДУ отличается реализацией двойникования во время всего процесса, что обусловлено низкой вероятностью аннигиляции дислокаций и необходимостью активизации дополнительных деформационных систем для реализации пластической деформации из-за наличия анизотропии решетки и большого числа не способных к переползанию расщепленных дислокаций, которые могут формировать барьеры Ломера-Коттрелла [16]. Ключевую роль в процессе измельчения для материалов с низкой ЭДУ играют первичные границы двойников, образующиеся на ранних стадиях деформирования. Движущиеся дислокации закрепляются на границах двойников и преобразуют их в границы зерен. Дальнейшее увеличение деформации приводит к увеличению количества вторичных двойников и дефектов упаковки, которые разделяют зерно на более мелкие равноосные части. За счет реализации двойникования для таких материалов достигается более мелкий предельный размер зерна [31].

В диссертационной работе ограничимся рассмотрением ГЦК-материалов, для которых процесс фрагментации можно описать за счет механизмов, характерных для материалов с высокой ЭДУ и подробно описанных выше. При этом не учитывается влияние двойникования на реализацию процесса фрагментации.

Таким образом, на основе обзора экспериментальных материаловедческих исследований процесса измельчения зерен ГЦК-металлов установлено, что имеет место сложный сценарий реализации механизмов деформирования и эволюции дефектной субструктуры, в ходе которых крупнозернистый материал становится мелкозернистым. В следующем разделе приведены результаты обзора теоретических исследований процесса измельчения зеренной структуры,

в которых предпринимались попытки учесть ключевые особенности, характерные для рассматриваемого процесса.

1.2. Математические модели материалов, включающие описание фрагментации зеренной структуры

На сегодняшний день существует множество моделей, предложенных для описания изменения зеренной структуры материала и, в частности, процесса измельчения; можно провести их классификацию по группам: континуальные макрофеноменологические модели, континуальные и многоуровневые физически-ориентированные модели [103,104]. В ходе обзора все рассматриваемые работы были проанализированы, в том числе, с оценкой возможности и целесообразности их применения в существующей двухуровневой статистической конститутивной модели (глава 2), которая в диссертационной работе используется в качестве базовой для описания неупругого деформирования материала.

1. Континуальные макрофеноменологические модели

К первой группе моделей относятся континуальные макрофеноменологические модели. К настоящему моменту разработано достаточно много моделей данного класса.

Авторами работы [105] предложен подход, основанный на теории Био, в котором образование субзеренной структуры рассматривается как вызванная деформациями внутренняя неустойчивость в кристалле, моделируемом как анизотропная вязкая среда. В рамках модели при одноосном растяжении в плоской постановке рассматриваются способные к скольжению и переползанию дислокации и вводятся два коэффициента M и L , описывающих сопротивление скольжению и переползанию, соответственно. В результате аналитического решения задачи показано, что при различном значении отношения M/L формирование субструктуры (в виде деформационных полос) будет происходить

по-разному: при низкой температуре, когда переползание затруднено, $L \rightarrow \infty$ и деформация будет однородной; при повышении температуры начинает проявляться неустойчивость, что выражается в образовании субзеренной структуры. Отмечается качественное сходство модельных результатов и экспериментальных данных.

В статье [77] предложена модель для качественного описания фрагментации и образования пор при пластическом деформировании для материалов с высокой ЭДУ. Для этого в работе вводятся два параметра: удельная площадь границ фрагментов и удельный объем микропор на единицу объема материала. Основным механизмом измельчения в рассматриваемой работе является релаксация зон накопления (частей кристалла с изгибами решетки, вызванных неоднородностью сдвига по системам скольжения) с образованием либо микропор, либо зародышей высокоугловых границ, в качестве которых рассматриваются частичные дисклинации. Для указанных переменных записываются эволюционные уравнения, в которых коэффициенты определяются по характеристикам решетки кристаллов и величине среднего давления. Показано, что построенная модель отражает основные закономерности процесса измельчения (существование предельного размера зерна, влияние на процесс давления).

Авторами в [78] предлагается модель для описания измельчения зерен и обусловленного им упрочнения поликристаллического материала при ИПД. Для этого в модели отдельно вводится феноменологически зависимость для размера ячеек и блоков ячеек от накопленной пластической деформации, а также предлагается соотношение для определения напряжения течения, в котором учитываются и размеры ячеек, и размеры блоков. Указанная модель применена для описания поведения алюминия при РКУП и циклическом растяжении–сжатии. Показано, что модель способна описывать уменьшение размеров ячеек и блоков ячеек, рост доли высокоугловых границ и упрочнение при вышеупомянутых процессах ИПД.

В работе [84] предложена упругопластическая конститутивная модель для описания измельчения зеренной структуры при поверхностной обработке изделия. Модель построена на основе теории пластического течения, в которой напряжения течения зависят от накопленной пластической деформации (множитель, отвечающий за деформационное упрочнение), скорости деформации (необходимо для учета упрочнения, связанного со скоростью деформаций), температуры (для описания возможного разупрочнения за счет температуры) и микроструктурных параметров, среди которых в данном случае учитывается только размер зерна. Для эволюции размера зерна приводится простое экспоненциальное соотношение с зависимостью от накопленной деформации. Полученное конститутивное соотношение встроено в решение краевой задачи с помощью метода конечных элементов (МКЭ) и продемонстрировано удовлетворительное соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных для эволюции размера зерна.

Существуют некоторые сложности применения в рамках разрабатываемой многоуровневой КМ соотношений рассмотренных макрофеноменологических моделей, так как в последних определяющие соотношения строятся через довольно сложные зависимости напряжений от деформаций, содержащих константы, которые неявно учитывают протекающие на мезоуровне процессы. Поэтому в дальнейшем макрофеноменологические модели не применяются при построении целевой многоуровневой КМ для описания фрагментации зерен.

2. Континуальные и многоуровневые физически-ориентированные модели

Ко второй и третьей группам относятся, соответственно, континуальные и многоуровневые физически-ориентированные модели, основанные на явном рассмотрении механизмов изменения внутренней структуры. Поскольку целью работы является разработка физически обоснованной КМ, корректно учитывающей все ключевые механизмы измельчения зерен, далее существующие модели указанных классов рассматриваются, в первую очередь,

с точки зрения описания отдельных значимых механизмов (дислокационного скольжения и процессов, основанных на введении дисклинаций). Особенность многоуровневых КМ заключается во введении на различных структурно-масштабных уровнях внутренних переменных для явного описания эволюции структуры материала и взаимодействующих механизмов деформирования. Одним из преимуществ таких моделей по сравнению с вышеупомянутыми макрофеноменологическими моделями является их универсальность, то есть применимость при определенном подборе параметров для широкого класса материалов и типов нагрузжений [30]. При этом стоит отметить, что в многоуровневые модели на нижележащих масштабных уровнях могут быть относительно легко встроены элементы континуальных физически-ориентированных моделей.

Применению одной из простых моделей, основанной на геометрических соотношениях, для описания измельчения в рамках многоуровневой модели посвящена работа [106]. В ней авторы используют вязкопластическую самосогласованную конститутивную модель для исследования развития текстур при РКУП и геометрическую модель для описания измельчения зерен (их размеров и формы) поликристаллического образца с ГЦК решеткой. Принимается, что зерна имеют эллипсоидальную форму с длинной (L), средней (M) и короткой (S) осями и используется геометрический (основанный на форме зерен) критерий разделения зерна – при выполнении условий $L/S > R$ и $M/S < R/2$, где R – некоторое критическое значение, зерно разделяется на два зерна равных размеров (одиночное разделение), а при выполнении условий $L/S > R$ и $M/S > R/2$ – на четыре новых зерна равных размеров (двойное разделение). Приводятся результаты по сравнению влияния маршрутов РКУП на получаемые текстуры, формы и размеры зерен. Авторами отмечается необходимость использования физически-ориентированных моделей для описания процесса измельчения зеренной структуры.

2.1. Дислокационно-дисклинационные модели

Существуют работы, в которых для описания процесса измельчения в модели, помимо дислокаций, явным образом вводятся дисклинации. Дисклинации – дефекты ротационного типа, которые впервые были введены Вольтерра вместе с дислокациями – дефектами трансляционного типа [107]. К экспериментально наблюдаемым субструктурам, которые можно интерпретировать с помощью частичных дисклинаций, относятся оборванные малоугловые дислокационные границы (стенки дислокаций) [19,108], микрополосы [109], границы двойников [110], стыки границ зерен, блоков ячеек [109]. Причем с энергетической точки зрения дисклинация не может быть одиночной, в материале всегда образуются диполи, квадруполь и другие мультиполи дисклинаций [109,110]. В работах В.В. Рыбина и его коллег показывается, что процесс измельчения зерен происходит за счет роста малоугловых оборванных границ из стыков, образованных границами зерен [19,111]. Этот процесс подробно описывается в [48], где отмечается, что из-за несовместности пластической деформации в разных зернах в стыках на границе между ними зарождаются стыковые дисклинации, которые своими дальнедействующими полями возмущают поток дислокаций в прилегающих зернах, и в результате вблизи границы формируется мезоструктура из оборванных дислокационных границ, которые можно описать с помощью частичных дисклинаций. Затем образованные таким образом частичные дисклинации снова возмущают поток дислокаций и снова формируется структура из оборванных дислокационных границ и так далее. Таким образом, частичные дисклинации постепенно прорастают вглубь зерна, разделяя его на более мелкие фрагменты. Отметим, что в случае исследования процесса фрагментации применение дисклинационных моделей является лишь одним из методов для его описания, в котором дисклинации вводятся как аппроксимация дислокационных субструктур [86,110]. Их введение обусловлено повышением вычислительной эффективности из-за отсутствия необходимости описывать

отдельно каждую дислокацию, как это делается в дислокационной динамике [86].

В качестве более физически обоснованного критерия деления зерна в вязкопластической самосогласованной модели [106] можно использовать предложенную в [85] дисклинационную модель в плоской постановке. Авторами предложено описание процесса разделения исходного зерна на основе рассмотрения дисклинаций в его стыках, образованных из-за несовместности пластической деформации зерна и окружения, и возможности прорастания этих дисклинаций вглубь зерна при достижении их мощности порядка $1-3^\circ$. В результате исходное зерно разделяется на четыре новых зерна с меньшим размером. Дополнительно в работе приводится энергетический критерий разделения зерна. В статье [88] приводится усовершенствование модели [85] для объемного случая и описания процесса разделения зерен для ГЦК-поликристалла при РКУП (маршрут С). Показано, что самосогласованная упруговязкопластическая модель с учетом критерия разделения зерна лучше предсказывает формирование текстуры. Заметим, что хотя в указанных работах используется более четкие физические предпосылки по сравнению с работой [106], соотношение для изменения размера зерна в явном виде не приводится, то есть описание процесса измельчения рассматривается только с точки зрения поворотов частей зерна. В таких моделях обычно не учитывается, что дислокации могут образовывать различные субструктуры, тем самым разделяя зерно на ячейки/блоки ячеек, то есть в них либо используется некоторая гипотеза о разделении зерна на новые зерна, либо рассматривается изначально агрегат из субзерен, которые впоследствии при разворотах станут новыми зернами. Таким образом, уже на начальном этапе неявно закладывается средний размер зерна, который должен получиться. При этом для корректного описания процессов ИПД с применением такого способа требуется малый размер разворачивающихся субзерен, что является существенно ресурсоемкой задачей; в настоящей работе предлагается более численно эффективная модель.

В статье [112] предложена модель для описания эволюции ячеистой и фрагментированной структур, в которой размеры ячеек и блоков ячеек (фрагментов) учитываются в соотношении для критических напряжений сдвига. Основной особенностью является дислокационно-дисклинационное описание процесса измельчения: размер ячейки связывается с плотностью дислокаций в стенке ячейки, размер фрагмента – с плотностью частичных дисклинаций. Для указанных плотностей записываются эволюционные уравнения, основанные на физических процессах. В то же время приводится уравнение для описания разориентации блоков ячеек. В дальнейших работах [113,114] предложены усовершенствования моделей вышеупомянутого подхода и применения их для исследования поведения различных материалов.

В работе [115] приведено детальное описание построения модели, учитывающей распределение дислокаций и дисклинаций в кристаллите и позволяющей анализировать эволюцию субзеренной структуры. Отмечается, что при пластическом деформировании микроструктура материала состоит из отдельных ячеек и блоков ячеек, при этом разориентация блоков существенно больше, чем разориентация ячеек в блоке. Границы указанных элементов можно рассматривать как стенки геометрически необходимых дислокаций (для ячеек) и дисклинационных диполей (для блоков ячеек). В работе приведено мультипликативное разложение градиента места, в котором в отличие от классического варианта учитывается еще один сомножитель, отвечающий за остаточные (после снятия внешней нагрузки) упругие искажения решетки и обусловленный наличием в кристаллите дефектов и порождаемых ими микродеформаций. Наряду с кинематическими соотношениями записываются балансовые уравнения, законы термодинамики и определяющие соотношения. Результаты применения модели не приводятся. Вероятно, это вызвано сложностью ее реализации с применением численных методов. Таким образом, указанную модель (ее части) довольно сложно интегрировать в многоуровневые КМ.

В статье [116] предложена линейная упругопластическая модель, учитывающая трансляционные (дислокации) и ротационные (дисклинации) дефекты кристаллической решетки. Для описания дислокаций используется тензор плотности дислокаций Ная [117], определяемый по искажению решетки (пластической или упругой части градиента перемещений), а для описания дисклинаций – тензор плотности дисклинаций, определяемый по тензору кривизны решетки. Для учета движения дефектов записываются уравнения переноса, в которых скорости дислокаций и дисклинаций вычисляются на основе термодинамических предпосылок. Авторы отмечают, что предложенный подход применим только на атомарном уровне, характерном для исследований молекулярной динамики, и может пригодиться для описания областей, в которых важно учитывать ротационные эффекты (например, для границ зерен). В работе также приводятся результаты применения указанной модели для описания границы с большим углом разориентации с помощью дисклинационного диполя и ее поведение при растяжении.

Авторами [81] предложена двумерная дислокационно-дисклинационная модель для описания формирования дислокационных стенок при ударном нагружении. Для этого в модели записывается система обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих динамику движения дислокаций под действием приложенных касательных напряжений и полей напряжений от дисклинаций, распределенных на границах субзерен. Для образца из алюминиевого сплава показано, что для процесса фрагментации достаточно характерной для ударного нагружения продолжительности импульса (650 нс) и величины напряжения 0.5 ГПа. Результаты моделирования удовлетворительно согласуются с данными экспериментов. Указанная модель является двумерной и основана на использовании дискретного подхода (дислокационной динамики), что ограничивает ее применение в рамках континуальной трехмерной многоуровневой КМ.

Отметим, что использование дислокационно-дисклинационных моделей в рамках разработанной базовой двухуровневой КМ проблематично, так как в определяющих соотношениях помимо учета дислокаций необходимо ввести еще эволюционные уравнения для дисклинаций, что требует отдельного исследования и является одним из перспективных направлений развития моделей данного класса. В работах [118,119] предпринимались попытки учета в рамках многоуровневого подхода несовместности пластических сдвигов в разных кристаллитах, с которыми связывается возникновение стыковых дисклинаций и распространение вглубь зерна частичных дисклинаций [19,48], однако собственно дисклинации явным образом не учитывались. Отметим, что в рамках диссертационной работы описание процесса фрагментации будет основано на эффективных характеристиках дислокационной структуры, то есть дисклинации явно учитываться не будут. Далее приведем примеры некоторых существующих моделей без учета дисклинаций и проведем их анализ.

2.2. Дислокационные модели

Применение дислокационно-ориентированной модели [120,121] для исследования поведения сплавов Al-Mn и Al-Mg при больших деформациях приведено в работе [83]. Модель основана на рассмотрении ячеистой структуры, в которой для каждой ячейки записываются эволюционные уравнения для плотности дислокаций во внутренности и стенке, размера ячейки и угла разориентации. При увеличении плотности дислокаций в стенке, увеличивается разориентация ячеек друг относительно друга, что приводит к трансформации ячеек в субзерна и затем в более мелкие зерна. Размеры ячеек учитываются в соотношении для напряжения течения. Показано удовлетворительное соответствие результатов моделирования и экспериментальных данных для одноосного растяжения образцов из вышеуказанных сплавов.

Стоит отметить, что в части работ явным образом исследуются только развороты субзерен и вводится критерий, по которому субзерно будет считаться

новым зерном, то есть в моделях не приводятся соотношения для эволюции размера зерна (субзерна). Как отмечено выше, такой способ не учитывает формирование дислокационных субструктур при деформировании и для описания протекающих процессов при реальных ИПД может быть численно неэффективным.

В статье [122] используется вязкопластическая статистическая модель Тейлора для описания измельчения зеренной структуры при кручении образца из алюминиевого сплава 1050 при повышенных температурах. В модели каждое из зерен представляется агрегатом, состоящим из субзерен с распределением ориентаций по отношению к родительскому зерну в пределах 1° по нормальному закону. Авторы численно исследуют переход малоугловых границ в высокоугловые при кручении и проводят сравнение с экспериментальными данными. В работе показано, что при величине эквивалентной деформации больше 2 наблюдается более 50% доли высокоугловых границ с осями разориентации, близкими к радиальному направлению образца.

Авторами работы [89] предложена трехуровневая вязкопластическая модель для описания измельчения зеренной структуры. Элементом верхнего уровня является поликристаллический агрегат, элементом второго уровня – зерно, состоящее из элементов третьего уровня – субзерен. Субзерна имеют небольшую разориентацию ($<1^\circ$) друг относительно друга. Рассматриваются различные комбинации подходов для связи характеристик соседних уровней: использование «полностью стесненной» модели Тейлора (гипотеза Фойгта) и самосогласованной модели. В ходе деформирования определяются средние углы разориентаций зерен и субзерен. С увеличением угла разориентации субзерна с другими субзернами, оно может стать новым зерном. Предложенная модель применена для описания измельчения при РКУП (маршрут В_с) алюминия и алюминиевого сплава. Результаты моделирования для текстур и разориентаций субзерен находятся в удовлетворительном соответствии с данными экспериментов.

В работе [90] предлагается развитие вышеописанной модели за счет рассмотрения прямой КМ ФТП, что позволяет учесть неоднородность НДС в зернах и их взаимодействие между собой. Переход субзерен в новые зерна, как и в работе [89], описывается с использованием критического угла разориентации. Авторы исследуют пять выборок, состоящих из 64 зерен, с различным количеством кубических конечных элементов в них и различной формой зерен (рассматриваются зерна кубической формы и полиэдры). Предложенный подход применяется для моделирования одного прохода РКУП. В результатах приводятся данные о получаемых текстурах, изображения поликристалла с образовавшимися новыми зернами и распределения разориентаций. Все результаты анализируются в соответствии с экспериментальными данными. Стоит отметить, что в расчетах с рассматриваемой моделью образование новых зерен происходит от границ, что подтверждается экспериментальными данными. Однако для выборок с большим количеством элементов в значительной части зерен измельчение не происходит в их внутренностях. Также отмечается, что для достижения экспериментально наблюдаемого размера зерен необходимо увеличивать количество элементов. В заключении приводятся доказательства двух гипотез о возможных механизмах измельчения. В первой из них утверждается, что зерна, имеющие неперпочтительную ориентацию по отношению к приложенной деформации, больше предрасположены к измельчению, а во второй – что образование новых зерен происходит у границы для обеспечения совместности.

В статье [123] предложено расширение для самосогласованной вязкопластической модели для описания измельчения зерен. Рассмотрен подход для материала с ГПУ решеткой, при котором дислокации на системах скольжения различных семейств могут вступать в реакции [124], образуя тем самым сидячие дислокации, скопления которых, в свою очередь, являются дислокационными стенками или малоугловыми границами. Развороты частей зерна связываются с накоплением дислокаций около таких границ. Приведены

результаты по применению описанной модели для РКУП монокристалла магния (рассмотрены две ориентировки кристаллографической системы координат относительно характерных осей обработки) для текстур, распределений разориентаций и долям границ с различным числом совпадающих узлов. Результаты моделирования можно считать удовлетворительно соответствующими экспериментальным данным.

В работах [91,92] используется подход, связывающий континуальное описание эволюции плотностей дислокаций на системах скольжения [125–127] и вязкопластическую модель типа Линя. Авторами предполагается, что зерна имеют кубическую форму и могут разделяться на несколько новых зерен при выполнении критерия измельчения. Зерна отличаются между собой ориентацией, положением (рассматривается двумерный случай) и размером зерна (в начальный момент времени предполагается одинаковым для всех зерен). В работе [91] делается предположение о разделении исходного зерна на четыре новых зерна меньшего размера, а в работе [92] – на девять новых зерен. В обеих работах рассматривается три уровня фрагментации, то есть исходное зерно может фрагментироваться, затем каждое из новых зерен тоже может фрагментироваться и снова каждое из новых зерен может фрагментироваться. Критерий измельчения строится на основе работы [128] и заключается в том, что зерно может разделиться, если угол разориентации между центром зерна и его границей достигает 5° , причем учитывается взаимодействие между зернами. Построенная модель применяется для описания текстуры, эволюции плотности дислокаций и размера зерна при РКУП меди при маршрутах А, В_с [91] и РКУП алюминия Al-1100 при маршруте С [92]. Отметим, что используемый в рассматриваемых работах подход континуальной дислокационной динамики является промежуточным звеном между дискретной дислокационной динамикой [129,130] и соотношениями для описания скорости сдвига дислокаций и упрочнения в КМ ФТП [125–127].

Отдельно можно выделить модель для описания измельчения с использованием клеточных автоматов (КА) [131,132]. Рассматриваемый в работах КА используется для генерации начальной микроструктуры и для описания ее эволюции при ИПД. Для этого в КА используются полученные в прямой упругопластической модели данные о дислокационной субструктуре. При достижении плотности дислокаций в ячейках КА некоторого критического значения, формируются дислокационные стенки, которые трактуются как малоугловые границы. Дальнейшее деформирование приводит к увеличению угла разориентации и трансформации малоугловых границ в большеугловые, то есть к образованию новых более мелких зерен. Предложенная модель применена для описания процессов ИПД для алюминия и стали; результаты численных расчетов удовлетворительно согласуются с данными экспериментов. В работах [133,134] применяется аналогичный указанному выше подход и разрабатывается комбинированная модель, в которой для описания поведения образца на макроуровне используется МКЭ в упругопластической постановке, где в качестве определяющего соотношения записываются соотношения теории пластического течения; затем данные о пластическом деформировании в выбранной точке интегрирования передаются в клеточный автомат, в результате работы которого вычисляются данные об эволюции микроструктуры. Указанная модель применяется для описания измельчения зерен и эволюции их формы в ходе процесса изготовления проволоки из микролегированной стали с дисперсно-распределенными жесткими частицами. Приводится сравнение результатов моделирования и данных экспериментов при различных стадиях изготовления.

В работе [37] предложена дислокационно-ориентированная модель для описания упрочнения материала вплоть до стадии, предшествующей насыщению напряжений течения при больших деформациях (стадия V, рисунки 7, 8) [120,135,136], на кривой деформирования для поликристаллических материалов, способных к образованию ячеек. В работе предполагается, что

ячейка в материале состоит из двух «фаз» – внутренней и стенки [35]. Рассматривается нагружение простым сдвигом для образца из меди в плоской постановке. Для внутренних и стенок отдельно записываются эволюционные соотношения для плотностей дислокаций и по правилу смесей (взвешенная по объемной доли стенок сумма плотностей дислокаций во внутренних и стенках ячейки) находится общая плотность дислокаций, с которой связывается изменение среднего размера ячейки. Для описания упрочнения авторами предполагается, что касательные напряжения в материале также можно записать с использованием правила смесей для касательных напряжений во внутренних и стенках, которые прямо пропорциональны квадратному корню из соответствующей плотности дислокаций (закон Тейлора [137,138]). Результаты моделирования удовлетворительно согласуются с данными натурных экспериментов для упрочнения на стадиях нелинейного упрочнения (стадия III), линейного упрочнения при больших деформациях (стадия IV) и вышеописанной стадии V. Рассмотренная модель получила название ETMB (в честь авторов оригинальной статьи – Y. Estrin, L.S. Toth, A. Molinari, Y. Brechet). Развитие модели ETMB для трехмерного случая предложено в работе [93]. В работах [139,140] предложено расширение модели для описания средней разориентации ячеек, которая связывается с плотностью геометрически необходимых дислокаций (ГНД). В работе [80] приведены результаты детального анализа соотношений модели ETMB и предложена их модификация для адекватного описания с помощью модели нагружений с изломом траектории деформации, характерных для РКУП. Отметим, что модель ETMB широко используется и в рамках многоуровневого подхода [87,128,141–143].

В цикле работ [87,141,142] для описания измельчения зерен ГЦК-поликристаллов используется прямая упруговязкопластическая модель совместно с соотношениями, основанными на модели ETMB [37,93]. В описываемом подходе рассматриваются плотности трех типов дислокаций – статистические накопленные дислокации (СНД), геометрически необходимые

дислокации и зернограницные дислокации, для которых записываются эволюционные уравнения. Для описания зеренной структуры используются многогранники Вороного. В работах приводятся результаты численных экспериментов для НДС, плотности СНД, ГНД, зернограницных дислокаций, размеров ячеек, углов разворотов зерен и отмечается удовлетворительное соответствие модельных расчетов и экспериментальных данных для различных задач (прокатка алюминиевой полосы, одноосное растяжение медного образца). Отдельно отметим, что в рассматриваемых работах решение задачи приводится в плоской постановке.

В работах [128,143] приводится описание измельчения зерен на основе модели Тейлора. Используются соотношения модели ЕТМВ для определения плотностей дислокаций в стенках и внутренностях ячеек, а также разориентации ячеек. Дополнительно в общую плотность дислокаций добавляется слагаемое, соответствующее дислокациям, вызванным искривлением решетки за счет различий в поворотах центральной части зерна и приграничной зоны. Авторы представляют зерна в виде кубов и вводят критерий разделения зерна, согласно которому зерно разделяется на 27 новых зерен (возможно три последовательных уровня разделения зерна), если разориентация субзерен достигает критического значения (в работе принято 5°). Приведены результаты для средних размеров зерен, текстур, распределений разориентаций и размеров зерен, плотностей дислокаций при РКУП меди. Показано удовлетворительное соответствие результатов вычислительных и натурных экспериментов.

По итогам приведенного выше аналитического обзора литературы можно заключить следующее.

Для достижения цели работы (путем решения задач работы) по созданию вычислительно эффективной модели для углубленного описания процесса измельчения наиболее перспективным представляется использование многоуровневого моделирования, поскольку оно позволяет за счет введения внутренних переменных явно учитывать эволюцию изменяющейся структуры

материала и реализующиеся при фрагментации механизмы деформирования, которые определяются в основном эволюцией дислокационной структуры материала. Поэтому для описания измельчения зерен в ходе процессов ОМД и ИПД целесообразно разрабатывать дислокационные модели с учетом эволюционных уравнений для характеристик ключевых типов дислокаций в материале.

К сожалению, не удалось найти исследований, в которых процесс фрагментации описывается с использованием многоуровневых конститутивных моделей с комплексным учетом изменения всех ключевых характеристик структуры материала – размеров зерен, субзерен, их разориентации и эволюции плотностей дислокаций в них. Согласно приведенным выше результатам обзора, зачастую исследователи дают упрощенное модельное описание реальной сложной физики процесса. Автором найдено лишь несколько работ, в которых процесс фрагментации описывается на двух структурных уровнях – уровне зерен/блоков ячеек и уровне блоков ячеек/субзерен/ячеек [78,89]. В большинстве разработанных моделей рассматривается эволюция либо размера зерна при деформировании без явного учета эволюции более мелких структурных элементов, например [91,92], либо размера отдельных ячеек/блоков ячеек/субзерен с применением гипотезы о соответствии последнего среднему размеру зерна при очень больших деформациях [37,82,83,87,93]. Некоторые модели построены в алгоритмическом ключе с большой ресурсоемкостью для реализации попытки явного учета генерации новых зерен и механизмов трансформации [91,92].

Таким образом, можно сделать вывод о том, что существующие модели фрагментации зачастую с недостаточной углубленностью учитывают физические механизмы процесса измельчения. При этом имеющиеся детализированные КМ вычислительно не эффективны и в то же время используют упрощенные описания некоторых механизмов деформирования, что делает модели не универсальными. В связи с этим задача совершенствования

аппарата многоуровневых КМ в плане описания фрагментации представляется весьма актуальной.

1.3. Развитие описания процесса фрагментации зеренной структуры: иерархия моделей

На основе аналитического обзора исследований по описанию фрагментации, представленного в разделах 1.1 и 1.2, была обоснована цель работы – создание многоуровневой статистической конститутивной модели для описания изменений напряженно-деформированного состояния и процесса фрагментации зеренной структуры металлов в ходе процессов обработки давлением при низких гомологических температурах. Указанная модель должна с детальностью, достаточной для углубленного моделирования технологических процессов обработки металлов, описывать физические процессы измельчения зерен при деформировании (изменения плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, значений среднего размера фрагментов и зерен, углов разориентации фрагментов), обладая при этом вычислительной эффективностью, позволяющей за приемлемое время описывать поведение материала при реализации процессов ОМД и ИПД.

При разработке математических моделей неупругого деформирования поликристаллических металлов будем придерживаться известной методологии [144], которая содержит этапы формулировки содержательной, концептуальной и математических постановок, аналитическую или численную реализацию описанных соотношений, проверку корректности и адекватности полученной модели и её практическое применение. При этом при построении моделей сложных систем зачастую необходимо разрабатывать не одну, а целую иерархию моделей [145], с разной степенью детализации описывающих реальный объект или процесс. Поэтому в текущем разделе на базе сведений, полученных в результате анализа существующих исследований (раздел 1.1, 1.2), сформулированы концепции базовых моделей фрагментации, позволяющих

пошагово подойти к построению целевой модели на основе дислокационного описания, интегрируемой в двухуровневую конститутивную модель. Первой рассмотренной моделью является наиболее детализированная (но ресурсоемкая) прямая модель, второй – наименее детализированная (но численно эффективная) модель (модификация модели ЕТМВ [37,93,146]). Схема иерархии моделей приведена на рисунке 1.2.

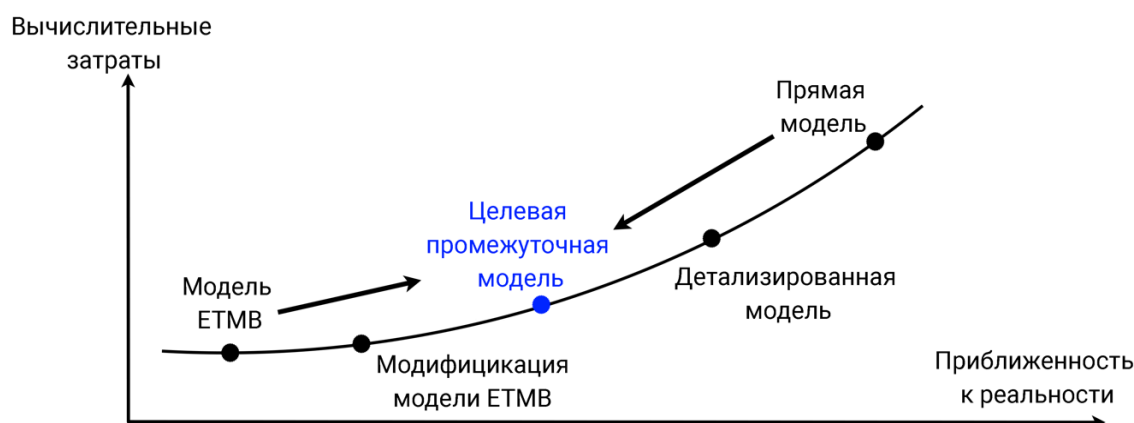


Рисунок 1.2. Иерархия моделей для описания процесса измельчения зерен

В прямой модели (ПрМ) фрагментация зерен моделируется с описанием эволюции каждой ячейки в отдельности (отметим для примера, что к классу прямых моделей относятся модели дискретной дислокационной динамики [81], молекулярной динамики [57,59] и другие [60,61]). Формулировка структуры соотношений ПрМ необходима для более глубокого понимания возможностей и ограничений максимально детального и основанного на физических данных математического описания процесса – для дальнейшего обоснованного построения более вычислительно эффективной модели. Безусловно, такая детализированная ПрМ крайне ресурсоемка, что не соответствует цели диссертации, поэтому формулировка ее отдельных соотношений и численная реализация в рамках диссертационной работы не осуществлялась.

О структуре наиболее ресурсоемкой прямой модели

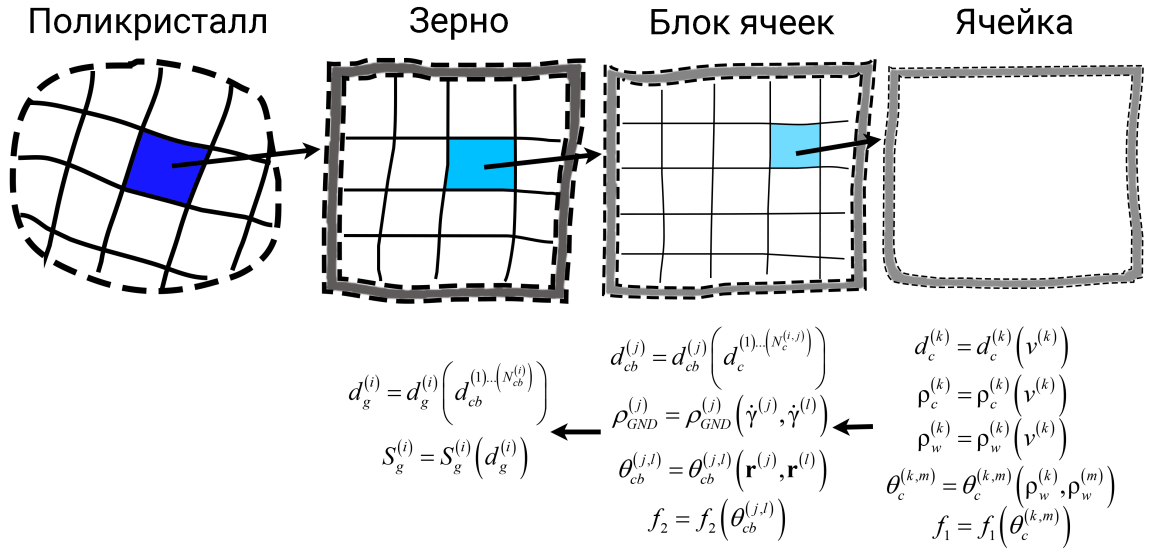


Рисунок 1.3. Схема прямой модели

Предполагается, что в рамках прямой модели (рисунок 1.3) явно моделируются ключевые элементы структуры материала (ячейки, блоки и зерна) и механизмы измельчения. В ПрМ объектом моделирования является состоящий из зерен представительный объем (ПО) материала. Для моделирования процесса измельчения в ПрМ генерируется выборка из [94] зерен с размерами $d_g^{(i)}$, $i = \overline{1, N_g}$. В рамках каждого зерна моделируется поведение совокупности из $N_{cb}^{(i)}$ блоков ячеек, ключевыми характеристиками которых являются размеры $d_{cb}^{(j)}$ и взаимный угол разориентации с другими блоками $\theta_{cb}^{(j,l)}$, $j, l = \overline{1, N_{cb}^{(i)}}$. Наименьшим структурным объектом в зерне является ячейка, которая характеризуется размером $d_c^{(k)}$ и углом разориентации с соседними ячейками в рамках одного блока $\theta_c^{(k,m)}$, $k, m = \overline{1, N_c^{(i,j)}}$. Количество ячеек в каждом блоке зерна обозначается $N_c^{(i,j)}$. Для каждой ячейки при описании их поведения вводится плотность дислокаций $\rho^{(k)}$, которая разделяется на плотность дислокаций во внутренностях $\rho_c^{(k)}$ и стенках ячеек $\rho_w^{(k)}$. Кроме стенок ячеек для адекватного описания процесса измельчения в ПрМ явным образом рассматриваются границы блоков

(субзерен), которые являются геометрически необходимыми границами, и границы зерен. Характеристиками границ блоков в прямой модели являются плотности геометрически необходимых дислокаций $\rho_{GND}^{(j)}$, а границ зерен – площади поверхности $S_g^{(i)}$. Далее концептуально опишем структуру соотношений ПрМ, необходимых для моделирования процесса измельчения, а также требуемые начальные условия для них.

1. В прямой модели зернами являются объекты, состоящие из блоков ячеек, отделенные между собой большеугловыми границами. Следовательно, размеры зерен зависят от размеров входящих в них блоков. Зерна отделены от других зерен большеугловыми границами, площади поверхности которых вычисляются по размерам зерен. Ориентации зерен определяются согласно расположению в них блоков ячеек.
2. Размеры блоков в ПрМ определяются на основе размеров отдельных ячеек, а углы разориентации вычисляются по ориентации решетки соседних блоков. При деформировании материала пластическая деформация отличается от блока к блоку и в ПрМ, согласно определению ГНД, плотность дислокаций в границах блоков зависит от скоростей сдвигов в рассматриваемом и соседнем блоках. Ориентации блоков вычисляются на основе расположения отдельных ячеек, которые, согласно определению, имеют близкую ориентацию относительно фиксированной системы координат.
3. Размеры отдельных ячеек вычисляются с применением микромасштабных методов, например, дискретной дислокационной динамики. С её помощью также можно определить плотности дислокаций во внутренностях и стенках ячеек, а также их разориентацию. С ростом деформации углы разориентации ячеек друг относительно друга увеличиваются.

С помощью ПрМ с приведенной выше структурой процесс измельчения *принципиально* описывается следующим образом. На начальной стадии

деформирования каждое зерно поликристалла состоит из крупных дислокационных ячеек, которые имеют малую разориентацию друг относительно друга и объединены в разделенные геометрическими необходимыми границами блоки. С ростом деформации происходит уменьшение размеров отдельных ячеек за счет образования в их внутренностях новых стенок и увеличения разориентации ячеек друг относительно друга за счет происходящих дислокационных процессов в стенках. Указанные дислокационные процессы в блоках описываются в ПрМ с помощью методов дислокационной динамики (возможно, с переходом на уровень молекулярной динамики). При этом с ростом деформации стенки ячеек трансформируются в геометрически необходимые границы. Следовательно, в ПрМ можно описать переход отдельных ячеек в блоки, где критерием перехода f_1 является достижение угла разориентации ячейки с окружением критического значения. Для исходных и образовавшихся из ячеек блоков при деформировании происходит уменьшение их размеров за счет перехода отдельных ячеек в новые блоки, а также увеличение взаимного угла разориентации до значений, соответствующим границам субзерен, из-за несовместности пластических сдвигов в разных блоках. Согласно вышесказанному, в ПрМ можно описать переход блоков ячеек в субзерна. При реализации процесса деформирования при очень больших деформациях (порядка 3–4 и выше) субзерна становятся новыми зернами за счет увеличения углов разориентаций до соответствующих большеугловым границам значений [40] (критерий f_2). Таким образом, в прямой модели описывается преобразование ячеек в новые зерна с явным учетом трансформации в блоки и субзерна. С применением методов дискретной дислокационной динамики для определения размеров ячеек, плотностей дислокаций в стенках и внутренностях, а также углов разориентации ячеек использование ПрМ для моделирования технологических процессов не представляется возможным с вычислительной точки зрения.

Вместо аппарата дискретной дислокационной динамики при формулировке замыкающих уравнений для характеристик отдельных ячеек могут использоваться феноменологические соотношения, которые сформулированы на основе аппроксимации большого числа экспериментальных данных по эволюции структуры материала. Тогда можно разработать ещё одну модель фрагментации, которая аналогично ПрМ будет описывать эволюцию размеров и разориентации блоков ячеек (с учетом изменений ячеистой структуры «в среднем» в каждом блоке) с переходом их в новые зерна. Но такая модель по-прежнему будет являться вычислительно неподъемной. На рисунке 1.2 указанная модель обозначена как «Детализированная модель».

О моделях, менее ресурсоемких по сравнению с прямой моделью

С другой стороны, наиболее приближенной построенной моделью, но имеющей близкий к минимально необходимому уровень физического описания является предложенная модификация [146] модели ЕТМВ [37,93], в которой процесс измельчения описывается как эволюция эффективной дислокационной ячейки в зерне при деформировании, при этом явно не учитываются изменение размера зерна и влияния границ блоков и границ зерен на процесс фрагментации, используется гипотеза о приближении среднего размера ячейки к среднему размеру зерна при очень больших деформациях в процессах ИПД, что ограничивает применимость данной модели только соответствующими условиями. Подробный анализ структуры соотношений модифицированной модели ЕТМВ представлен в главе 3 диссертации.

На основе анализа структуры ПрМ и модифицированной модели ЕТМВ была предложена целевая промежуточная модель на базе континуальной дислокационной динамики (далее будем называть её дислокационной моделью), в которой учитываются реализующиеся в процессе измельчения ключевые механизмы деформирования, при этом разработанная дислокационная модель обладает вычислительной ресурсоемкостью, достаточной для дальнейшего

эффективного моделирования реальных технологических процессов. Подробно структура дислокационной модели рассмотрена в главе 4 диссертационной работы. В конце раздела 4.1 приводится таблица, в которой сведены основные характеристики разработанных моделей.

2. Базовая двухуровневая статистическая конститутивная модель для описания неупругого деформирования поликристаллических металлов

В данной главе приведены концептуальная и математическая постановки задачи описания неупругого деформирования поликристаллического металла с использованием базовой двухуровневой конститутивной модели. Представлены результаты по оценке устойчивости модели к возмущениям входных данных и параметрам оператора, а также моделированию нагружений с изломом траектории деформации и проведен анализ полученных результатов.

2.1. Концептуальная постановка задачи описания деформирования представительного объема поликристаллического металла с использованием базовой двухуровневой конститутивной модели

При использовании аппарата многоуровневого моделирования описание деформирования материала происходит на нескольких структурно-масштабных уровнях. В базовой двухуровневой статистической КМ исследуют поведение представительного объема материала на макроуровне, который содержит достаточное для осреднения количество кристаллитов (элементов мезоуровня). Для описания изменения структуры и механизмов деформирования на мезоуровне вводятся внутренние тензорзначные переменные и записываются эволюционные уравнения для них. Для описания неупругого деформирования поликристалла введем фиксированную и связанную с наблюдателем лабораторную систему координат (ЛСК) и подвижную систему координат (ПСК), движение которой является квазитвердым [147].

На макроуровне напряжения в ПО равны среднему значению напряжений в отдельных кристаллитах [30] $\mathbf{K} = \langle \mathbf{k} \rangle$, где $\mathbf{K}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа макроуровня, $\mathbf{k} = \overset{\circ}{\rho} / \hat{\rho} \boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгоффа мезоуровня, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши мезоуровня, $\overset{\circ}{\rho}$, $\hat{\rho}$ –

плотность материала кристаллита в отсчетной (разгруженной) и актуальной конфигурациях, $\langle \cdot \rangle$ – обозначение операции осреднения.

На мезоуровне в качестве определяющего соотношения используется закон Гука в скоростной релаксационной форме, причем применяется подход к формулировке геометрически нелинейных определяющих и кинематических соотношений, основанный на разложении движения на мезоуровне с учетом симметрии материала [30,63]:

$$\begin{aligned}\mathbf{\kappa}^{cor} &\equiv \frac{d\mathbf{\kappa}}{dt} + \mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{\omega} - \mathbf{\omega} \cdot \mathbf{\kappa} = \mathbf{\Pi}_{(cor)} : \mathbf{z}_e, \\ \mathbf{z}_e &= \mathbf{l} - \mathbf{\omega} - \mathbf{z}_{in}, \\ \mathbf{z}_{in} &= \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)},\end{aligned}\tag{2.1}$$

где верхний индекс *cor* обозначает независящую от выбора системы отсчета (коротационную) производную, $\mathbf{\Pi}_{(cor)}$ – тензор упругих свойств кристаллита, его компоненты постоянны в подвижной системе координат, вращающейся со спином $\mathbf{\omega}$ и определяющей квазитвердое движение (коротационную производную) [63,67], $\mathbf{z}_e$, $\mathbf{z}_{in}$ – мера скорости упругой и неупругой составляющей деформации соответственно, $\mathbf{l} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T$ – транспонированный градиент скорости перемещений мезоуровня, $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения (в актуальной конфигурации) краевых дислокаций для системы скольжения k , K – удвоенное число кристаллографических систем скольжения, $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига по системе скольжения k .

В качестве основного механизма неупругого деформирования рассматривается внутризеренное дислокационное скольжение. Принимается гипотеза о том, что дислокации имеют однородное распределение и вводится интенсивная величина для описания их движения – скорость сдвига. Для определения скоростей сдвига по системам скольжения используется

упруговязкопластическое соотношение на основе уравнения Хатчинсона [148] с учетом активности систем скольжения с помощью функции Хэвисайда [30].

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad k = \overline{1, K}, \quad (2.2)$$

где $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига по системе скольжения k при достижении касательным напряжением критического напряжения, $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ – касательное и критическое касательное напряжение на системе скольжения k , m – показатель скоростной чувствительности материала по моде скольжения дислокаций, $H(\cdot)$ – функция Хэвисайда.

Согласно соотношению (2.2), скорости сдвига определяются только на системах скольжения, где выполнено условие $\tau^{(k)} \geq \tau_c^{(k)}$. Такой вид соотношения выбран для явного учета пороговости при пластическом течении, наблюдаемой в экспериментах при рассматриваемых малых температурах, и сохранении у $\tau_c^{(k)}$ исходного смысла – напряжения, при котором начинается скольжение дислокаций. Часто данного эффекта (значимых неупругих деформаций при $\tau^{(k)}$ близких к $\tau_c^{(k)}$) при использовании безпорогового исходного соотношения Хатчинсона достигают за счет использования высокого показателя степени в нем [149]. Отметим, что для этой же цели можно принять зависимость параметра $\dot{\gamma}_0$ от скорости деформации, как это сделано, например в работах [69,149]. Использование последней модификации целесообразно для моделирования реальных технологических процессов, где возможны существенные изменения скорости деформации; для монотонных нагружений и нагружений с изменением скорости деформации в небольшом диапазоне удобнее использовать постоянное значение параметра $\dot{\gamma}_0$. Более подробно вопрос учета в многоуровневых моделях изменения температуры и скорости деформации рассмотрен в работе [150]. Заметим, что, как показано далее, к неустойчивости использование порогового соотношения (2.2) не приводит.

Для определения касательных и эволюции критических касательных напряжений для внутризеренного скольжения используются соотношения [30]:

$$\boldsymbol{\tau}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\kappa}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (2.3)$$

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}_c^{(k)} = F_s(\mathbf{J}_{in}), \quad k = \overline{1, K}, \quad (2.4)$$

где $F_s(\cdot)$ – оператор для нахождения критических напряжений сдвигов по системам скольжения (закон упрочнения, конкретная форма которого формулируется ниже), $\mathbf{J}_{in}$ – вектор внутренних переменных, определяющих упрочнение материала.

Для нахождения тензора текущей ориентации $\mathbf{o}$ ПСК кристаллита относительно фиксированной ЛСК используется соотношение [30]:

$$\dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^T = \boldsymbol{\omega}. \quad (2.5)$$

Для определения спина ПСК записывается модель ротации ПСК, которая учитывает вызванные ВДС повороты решетки [30]:

$$\boldsymbol{\omega} = G(\boldsymbol{\omega}, \dot{\gamma}^{(k)}), \quad (2.6)$$

где $G(\cdot)$ – функция для определения спина подвижной системы координат, которая формулируется далее.

Для связи переменных на макро- и мезоуровне используется расширенная гипотеза Фойгта, в которой скорость деформации для каждого отдельного кристаллита совпадает со скоростью деформаций для всего ПО [30]:

$$\mathbf{I} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T(t) = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T(t) = \mathbf{L}, \quad (2.7)$$

где $\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона в актуальной конфигурации, $\mathbf{V}(t)$, $\mathbf{v}(t)$ – скорость движения материальной точки на макро- и мезоуровне соответственно.

Отметим, что в диссертационной работе используется КМ в скоростной форме в терминах актуальной конфигурации, которая дает близкие результаты к получаемым с помощью формулировки в терминах разгруженной конфигурации [45,151,152]. В работе [67] приводится подробный анализ этих моделей и для установления связи между ними используется формулировка с явным

выделением жесткой подвижной системы координат в мультипликативном представлении деформационного градиента [63].

2.2. Математическая постановка задачи описания деформирования представительного объема поликристаллического металла с использованием базовой двухуровневой конститутивной модели

Необходимо найти зависимости $\mathbf{K}(t)$, $\mathbf{\kappa}(t)$, $\gamma^{(k)}(t)$, $\tau^{(k)}(t)$, $\tau_c^{(k)}(t)$ ($k = \overline{1, K}$), $\boldsymbol{\omega}(t)$, $\mathbf{o}(t)$, удовлетворяющие системе алгебраических и дифференциальных уравнений [30, 146, 153–156]:

$$\mathbf{K} = \langle \mathbf{\kappa} \rangle, \quad (1)$$

$$\mathbf{\kappa}^{cor} \equiv \frac{d\mathbf{\kappa}}{dt} + \mathbf{\kappa} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{\kappa} = \boldsymbol{\Pi}_{(cor)} : \mathbf{z}_e, \quad (2)$$

$$\mathbf{z}_e = \mathbf{l} - \boldsymbol{\omega} - \mathbf{z}_{in}, \quad (3)$$

$$\mathbf{z}_{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad (4)$$

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_c^{(k)}} \right)^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad k = \overline{1, K}, \quad (5) \quad (2.8)$$

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{\kappa}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (6)$$

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = F_s(\mathbf{J}_{in}), \quad k = \overline{1, K}, \quad (7)$$

$$\boldsymbol{\omega} = G(\boldsymbol{\omega}, \dot{\gamma}^{(k)}), \quad (8)$$

$$\dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^T = \boldsymbol{\omega}, \quad (9)$$

$$\mathbf{l} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^T(t) = \hat{\nabla} \mathbf{V}^T(t) = \mathbf{L} \quad (10)$$

и начальным условиям

$$\mathbf{\kappa}(0) = \mathbf{0},$$

$$\tau_c^{(k)}(0) = \tau_{c0}^{(k)}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (2.9)$$

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0, \quad k = \overline{1, K},$$

$$\mathbf{o}(0) = \mathbf{o}_0,$$

где первое начальное условие характеризует, что отсчетная конфигурация считается естественной, $\tau_{c0}^{(k)}$ – начальное критическое напряжение сдвига для системы скольжения k , $\mathbf{o}_0$ – начальная ориентация ПСК относительно ЛСК.

Сформулируем алгоритм реализации базовой двухуровневой статистической КМ (2.8) для описания неупругого деформирования ПО материала, состоящего из кристаллитов. В диссертации рассматривается изотермический случай и квазистатическое нагружение с характерными скоростями деформации порядка 10^{-3} с^{-1} .

На макроуровне считается известным (например, из решения краевой задачи) кинематическое нагружение $\mathbf{L}(t)$ – в каждый момент времени задается транспонированный градиент скорости перемещений $\hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}^T(t)$ в ЛСК, по которому определяется мера скорости деформации (2.8)_з. При этом отметим, что для некоторых случаев, например, для одноосного нагружения невозможно задать движение чисто кинематически. Поэтому реализация одноосного нагружения в КМ выглядит следующим образом (детальное описание приведено в [30]). Предписанной является только одна компонента $L_{pp}^{LCK}(t)$, которая характеризует одноосное растяжение (или сжатие) вдоль оси ЛСК с номером p , остальные компоненты $\mathbf{L}(t)$, который предполагается симметричным, определяются из решения системы линейных алгебраических уравнений для обеспечения нулевой скорости изменения соответствующих компонент тензора напряжений на макроуровне $\dot{K}_{ij}^{LCK}(t) = 0$, $(ij) \neq (pp)$. При этом на мезоуровне НДС для каждого кристаллита является трехмерным. Для определения деформированного состояния на мезоуровне, как отмечено выше, используется расширенная гипотеза Фойгта. Начальные условия задаются согласно (2.9), параметры закона упрочнения определяются в ходе процедуры идентификации, описанной ниже.

При численной реализации КМ (2.8) может использоваться любая схема интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений; в диссертационной работе применялась явная схема Эйлера, в которой интегрирование эволюционного уравнения для некоторой переменной сводится к построению разностного аналога исходного уравнения и реализации итерационной процедуры вычисления значения соответствующей переменной в конкретный момент времени по значению этой переменной на предыдущем шаге и значению исходного уравнения в предыдущий момент времени.

На рисунке 2.1 приведена блок-схема вычисления НДС поликристалла на шаге интегрирования с применением явной схемы Эйлера.

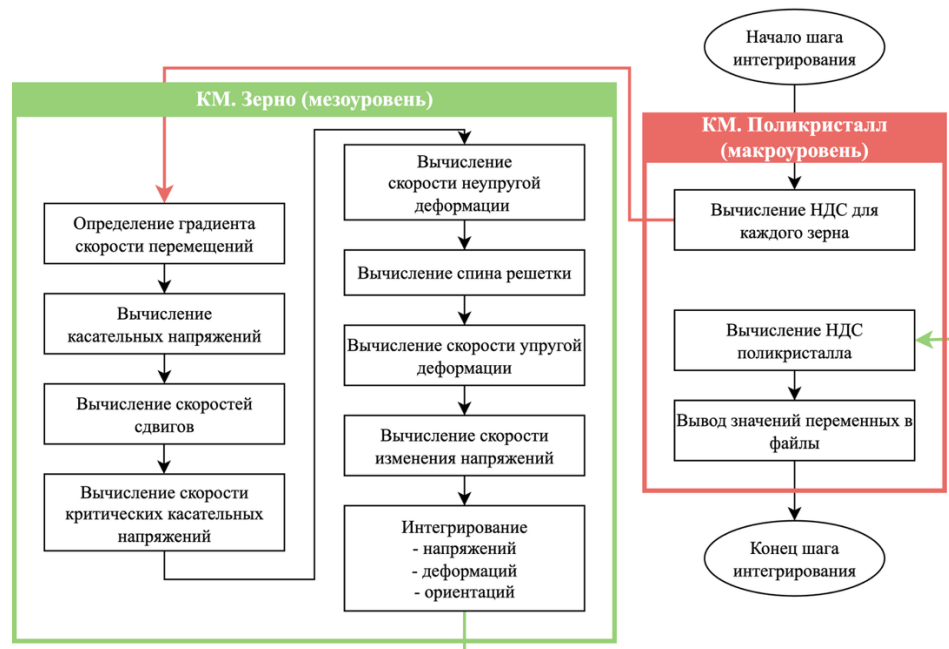


Рисунок 2.1. Блок-схема численной реализации базовой КМ на шаге интегрирования

Согласно схеме на рисунке 2.1, для каждого кристаллита в отдельности необходимо последовательно определить конечные значения, скорости соответствующих переменных системы (2.8) и проинтегрировать последние. По найденным компонентам тензора напряжений для отдельных кристаллитов с использованием операции осреднения вычисляются компоненты тензора напряжений макроуровня. Заметим, что применение стандартной схемы метода Эйлера для интегрирования тензора ориентаций нарушит его ортогональность,

поэтому в соотношении (2.8)₉ вводится $\Delta \mathbf{R}_t$ – тензор поворота за шаг, который вычисляется следующим образом [30]. На текущем шаге по времени по значению тензора спина определяется соответствующий вектор скорости поворота $\dot{\phi}_t = \frac{1}{2} \delta : \omega_t$, где δ – псевдотензор Леви-Чевиты. Тогда ось и угол поворота на шаге равны соответственно $\mathbf{e}_t = \dot{\phi}_t / |\dot{\phi}_t|$, $\Delta \phi_t = \Delta t |\dot{\phi}_t|$. И тензор поворота за шаг можно вычислить $\Delta \mathbf{R}_t = (\cos(\Delta \phi_t) + 1) \mathbf{e}_t \mathbf{e}_t + \cos(\Delta \phi_t) \mathbf{I} + \sin(\Delta \phi_t) \mathbf{e}_t \times \mathbf{I}$, где $\mathbf{I}$ – единичный тензор.

Для численной реализации основных операций при построении многоуровневых статистических конститутивных моделей, к которым относятся агрегирование различных внутренних переменных мезоуровня (тензоров скорости деформации, напряжений, упругих свойств и т.д.) в соответствующие величины макроуровня с помощью методов осреднения (по объему и среднего арифметического), передача воздействий с макроуровня на мезоуровень (декомпозиция/деагрегирование) и интегрирование по времени различных внутренних переменных произвольной физической природы, автором написан код пакета подпрограмм [95].

Важным этапом при численной реализации модели является проведение процедур идентификации её параметров и верификации получаемых с её помощью результатов. Процедуры идентификации и верификации осуществляются с использованием экспериментальных зависимостей о рассматриваемом процессе. Для многоуровневых КМ ФТП проведение процедуры идентификации зачастую является непростым этапом в связи с наличием в подобного класса моделях большого числа параметров, существенная часть которых вводится на нижележащих масштабных уровнях (мезоуровне, микроуровне), что затрудняет их определение. Верификация результатов моделирования обычно осуществляется при отличных от полученных в ходе идентификации значениях параметров и при других условиях нагружения (температурах и скоростях деформации). При этом при наличии

множества экспериментальных данных для рассматриваемого процесса их можно разделить и реализовать идентификацию на одном наборе, а верификацию на другом наборе зависимостей. Опишем далее процедуру идентификации параметров КМ (2.8). Заметим, что приведенный ниже в общем виде алгоритм применим и для расширенных КМ, описывающих фрагментацию, соотношения которых подробно рассмотрены в главах 3 и 4.

Первым шагом при идентификации параметров КМ (2.8) является установление значений части параметров, которые считаются известными из справочной литературы, или вычисляются в других источниках (преимущественно экспериментальных), или устанавливаются с использованием физических соображений из физики твердого тела, механики сплошных сред и других. В базовой КМ такими параметрами являются независимые компоненты в подвижной системе координат тензора упругих свойств $\mathbf{p}_{(cor)}$, скорость сдвига $\dot{\gamma}_0$, показатель скоростной чувствительности m . Затем на втором шаге процедуры идентификации необходимо определить значения оставшейся части параметров (к которым в базовой КМ относятся параметры закона упрочнения) с использованием экспериментальных данных. Для этого ставится задача оптимизации, в которой необходимо найти вектор параметров $\mathbf{P}$, доставляющий минимум целевой функции f . Для составления целевой функции с применением соотношений КМ описывается анализируемый процесс, в ходе которого определяются зависимости некоторых внутренних переменных модели от накопленной деформации. Найденные при моделировании зависимости сопоставляются с соответствующими данными, известными из экспериментов. Тогда в качестве целевой функции рассматривается:

$$f = \sum_{i=1}^{N_p} \frac{\left(x(\varepsilon_M^{(i)}, \mathbf{P}) - \bar{x}(\varepsilon_M^{(i)}, \mathbf{P}) \right)^2}{\left(\bar{x}(\varepsilon_M^{(i)}, \mathbf{P}) \right)^2}, \quad (2.10)$$

где $x(\varepsilon_M^{(i)}, \mathbf{P})$, $\bar{x}(\varepsilon_M^{(i)}, \mathbf{P})$ – значения некоторой переменной, определяемые в модели, и экспериментальные данные в момент деформирования с

интенсивностью накопленных деформаций $\varepsilon_M^{(i)}$, N_p – число точек в экспериментальной зависимости для рассматриваемой переменной.

При этом стоит отметить, что при идентификации параметров КМ целесообразно использовать экспериментальные зависимости для различных переменных модели и решать задачу поэтапно, определяя значения всех параметров не одновременно по одной кривой, а разделяя их на группы и вычисляя значения параметров в группе по соответствующей экспериментальной зависимости. В таком случае необходимо рассматривать несколько целевых функций типа (2.10), то есть задача оптимизации становится многокритериальной.

При разработке математических моделей целесообразно использовать проверенные реализации численных методов, поэтому в рамках диссертационной работы для идентификации параметров модели использовался коммерческий программный продукт IOSO [157], который включает в себя различные методы многокритериальной и многопараметрической оптимизации сложных нелинейных систем. В данном случае применялся встроенный численный метод оптимизации (IOSO NM), в котором на каждой итерации реализуется два ключевых этапа – построение функций, аппроксимирующих целевые функции в некоторой области поиска, и определение экстремумов этих функций.

2.3. Анализ результатов оценки устойчивости модели к возмущениям входных данных и параметров оператора

При применении сложных КМ для описания реальных технологических процессов зачастую возникает вопрос об их корректности. Для построенных на базе дифференциальных уравнений моделей, в частности базовой двухуровневой статистической КМ, «стандартным» методом проверки их корректности является анализ устойчивости к малым возмущениям параметров. В работе [158] разработана методика оценки устойчивости КМ к возмущениям входных данных

(начальных условий, воздействий) и параметрам оператора, согласно которой проведены исследования устойчивости моделей, описывающих неупругое деформирование ГЦК- и ГПУ-металлов [153,155].

В настоящем разделе для иллюстрации фундаментального свойства устойчивости структуры базовой КМ ФТП (усложненной двойникованием) и для демонстрации возможного развития работы для двойникующихся материалов приведены результаты применения разработанной в [158] методики для исследования устойчивости базовой двухуровневой КМ для описания неупругого деформирования ГПУ-поликристалла.

Для ГПУ-кристаллитов также характерен ещё один механизм пластического деформирования – двойникование. Двойникование, в основном, происходит в металлах, в которых наблюдаются существенные отличия в критических напряжениях сдвига по разным системам скольжения (например, в ГПУ-металлах). Также экспериментально установлено, что образование двойников может происходить в материалах с ОЦК- и ГЦК-решетками при низких гомологических температурах, при высоких скоростях деформирования, а также в материалах с низкой энергией дефекта упаковки. Следует отметить, двойники препятствуют скольжению дислокаций, вследствие чего существенно изменяется отклик материала – наблюдается значительное упрочнение [30].

Деформирование двойникованием в физических моделях пластичности часто описывается посредством соотношений, аналогичных по форме используемым для внутризеренных сдвигов [30]. Для определения скорости двойникового сдвига по системам двойникования используется соотношение вида [68]:

$$\dot{\gamma}_{tw}^{(s)} = \dot{\gamma}_{0tw} \left(\frac{\tau_{tw}^{(s)}}{\tau_{twc}^{(s)}} \right)^n H(\tau_{tw}^{(s)} - \tau_{twc}^{(s)}), \quad s = \overline{1, S}, \quad (2.11)$$

где $\dot{\gamma}_{0tw}$ – скорость двойникового сдвига по системе двойникования s при достижении касательным напряжением критического напряжения сдвига, n – показатель скоростной чувствительности материала по механизму

двойникования, S – удвоенное число кристаллографических систем двойникования, $\tau_{tw}^{(s)}$, $\tau_{twc}^{(s)}$ – касательное и критическое касательное напряжение для системы двойникования s .

Для определения касательных и изменения критических касательных напряжений для двойникования используются соотношения вида [68]:

$$\tau_{tw}^{(s)} = \mathbf{b}_{tw}^{(s)} \mathbf{n}_{tw}^{(s)} : \boldsymbol{\kappa}, \quad s = \overline{1, S}, \quad (2.12)$$

$$\dot{\tau}_{twc}^{(s)} = F_{tw}(\mathbf{J}_{in}), \quad s = \overline{1, S}, \quad (2.13)$$

где $\mathbf{b}_{tw}^{(s)}$, $\mathbf{n}_{tw}^{(s)}$ – единичные векторы направления двойникового сдвига и нормали к плоскости двойникового сдвига (в актуальной конфигурации), $F_{tw}(\cdot)$ – оператор для нахождения скорости критических напряжений по системам двойникования.

Влияние двойникования на напряженно-деформированное состояние кристаллита учитывается через меру неупругой скорости деформации $\mathbf{z}_{in}$ (2.8)₄,

которая дополняется слагаемым $\sum_{s=1}^S \dot{\gamma}_{tw}^{(s)} \mathbf{b}_{tw}^{(s)} \mathbf{n}_{tw}^{(s)}$.

В рамках структуры КМ в качестве закона упрочнения (2.8)₇ и (2.13) использовались соотношения [159]:

$$\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^K q_{\alpha\beta} h^\beta |\dot{\gamma}^{(\beta)}| + \sum_{\beta=K+1}^{K+S} q_{\alpha\beta} h^{(\beta-K)} |\dot{\gamma}_{tw}^{(\beta-K)}|, \quad \alpha = 1, \dots, K, \quad (2.14)$$

$$\dot{\tau}_{twc}^{(\alpha-K)} = \sum_{\beta=1}^K q_{\alpha\beta} h^\beta |\dot{\gamma}^{(\beta)}| + \sum_{\beta=K+1}^{K+S} q_{\alpha\beta} h^{(\beta-K)} |\dot{\gamma}_{tw}^{(\beta-K)}|, \quad \alpha = K+1, \dots, K+S, \quad (2.15)$$

где $q_{\alpha\beta}$ – компоненты матрицы связей между системами скольжения и системами двойникования ($q_{\alpha\beta} = 1$, $\alpha = \beta$), h^β – модули упрочнения, которые

для скольжения принимаются равными $h^\beta = h_0^\beta \left(1 - \frac{\tau_{c0}^{(\beta)}}{\tau_\infty^\beta} \right) \exp \left(-\frac{h_0^\beta \bar{\gamma}}{\tau_\infty^\beta} \right)$, а для

двойникования – $h^{(\beta-K)} = h_0^{(\beta-K)}$, h_0^β , τ_∞^β – параметры закона упрочнения, $\bar{\gamma}$ – суммарный накопленный сдвиг по всем системам скольжения.

Для описания ротации подвижной системы координат (2.8)₈ используется модель стесненного поворота Тейлора [30,160]:

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{I}^T) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} - \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}). \quad (2.16)$$

Альтернативной является модель решеточного поворота [63,66], в которой подвижная система координат связывается с элементами симметрии кристаллической решетки. Ранее было показано [67], что указанные модели дают между собой близкие результаты, которые также незначительно отличаются от модели «материального поворота» со спином, определенном на ортогональном тензоре, сопровождающем упругую деформацию [151,152].

Для идентификации и верификации данные, получаемые при использовании модели (2.8), сравнивались с экспериментальными данными по растяжению (сжатию) образцов чистого титана в различных направлениях (направлении прокатки (НП) и поперечном направлении (ПН)), приведенными в [161].

В модели рассматривается пять семейств систем скольжения: базисное ($\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$), призматическое ($\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$), два семейства систем пирамидального скольжения $\langle c+a \rangle$ (обозначим их как пирамидальное $\langle c+a \rangle -1$ ($\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$) и пирамидальное $\langle c+a \rangle -2$ ($\{11\bar{2}1\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$)), пирамидальное $\langle a \rangle$ ($\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$), а также два семейства систем двойникования: двойники сжатия ($\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$) и растяжения ($\{10\bar{1}2\} \langle \bar{1}011 \rangle$). Отметим, что исторически данные названия семейств связаны с тем, что при высоких температурах при растяжении вдоль оси $\langle c \rangle$ (оси симметрии 6-го порядка) двойникование обычно происходит по системам $\{10\bar{1}2\} \langle \bar{1}011 \rangle$, а при относительно низких температурах при сжатии вдоль оси $\langle c \rangle$ – по системам $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$. Стоит обозначить «этимологическую нестрогость» этих понятий: при определенных условиях при растяжении могут доминировать двойники сжатия и наоборот (проверено на отдельных тестовых вычислительных экспериментах).

В таблице 2.1 приведены параметры КМ для чистого титана, часть из которых подобрана в ходе процедуры идентификации для соответствия экспериментальным данным [161]. Значение компонент матрицы связей $q_{\alpha\beta}$ приняты такими же, как в [159], за исключением компонент, описывающих влияние двойников на упрочнение по системам пирамидального $\langle c+a \rangle -1$ и $\langle c+a \rangle -2$ скольжения – они приняты равными 0,9. В работе [162] отмечается, что имеется очень мало информации о значениях компонент матрицы связей для ГПУ-металлов, в том числе для α -титана; видимо, в связи с этим и назначение некоторых компонент матрицы величиной 2 в [159] обосновывается только соответствием результатов моделирования экспериментальным данным, при этом используется приближение об изотропной упругости для кристаллитов. Отметим, что принятые в диссертационной работе значения компонент 0,9 тоже удовлетворяют общепринятым соображениям о более сильном латентном взаимодействии между системами двойникования и системами скольжения, чем между системами скольжения.

Таблица 2.1. Параметры КМ для чистого титана

**В таблице использованы сокращения: баз. – базисные СС, призм. – призматические СС, пир.1 – пирамидальные $\langle c+a \rangle -1$, $\langle c+a \rangle -2$ СС, пир.2 – пирамидальные $\langle a \rangle$ СС, дв. сж. – двойники сжатия, дв. рас. – двойники растяжения*

Π_{1111}	Π_{3333}	Π_{1122}	Π_{1133}	Π_{1313}	m	n	$\dot{\gamma}_0$	$\dot{\gamma}_{0tw}$	$q_{\alpha\alpha}$	$q_{\alpha\beta}^{s \rightarrow tw}$	$q_{\alpha\beta}^{tw \rightarrow s}$
162.4 ГПа [68, 163]	180.7 ГПа [68,163]	92 ГПа [68, 163]	69 ГПа [68, 163]	46.7 ГПа [68, 163]	50 [68, 159]	50 [68, 159]	10^{-3} с^{-1} [159]	10^{-3} с^{-1} [159]	1	0.5	0.9
	баз.	призм.	пир.1	пир.2							
$\tau_{c0}^{(k)}$	110 МПа	55 МПа	110 МПа	81 МПа	110 МПа						
h_0	1950 МПа	2100 МПа	1435 МПа	580 МПа	175 МПа						
τ_∞	180 МПа	160 МПа	270 МПа	210 МПа	—						

Для проведения идентификации и верификации модели необходимо задать начальную текстуру. Это обусловлено особенностями технологического процесса изготовления титана из ильменитового концентрата, который включает следующие основные стадии: получение титанового шлака восстановительной плавкой, получение тетрахлорида титана хлорированием титановых шлаков, получение титана (губки, порошка) восстановлением из тетрахлорида [164]. Таким образом, при изготовлении титана получается губчатый материал, поэтому перед проведением экспериментов его прокатывают и отжигают. В связи с этим для проведения вычислительных экспериментов для идентификации и верификации в качестве начальной текстуры задавалась текстура прокатки, качественно близкая к приведенной в [165] (рисунок 2.2). Количество кристаллитов, составляющих представительный макрообъем, найденное из численных экспериментов, равно 343.

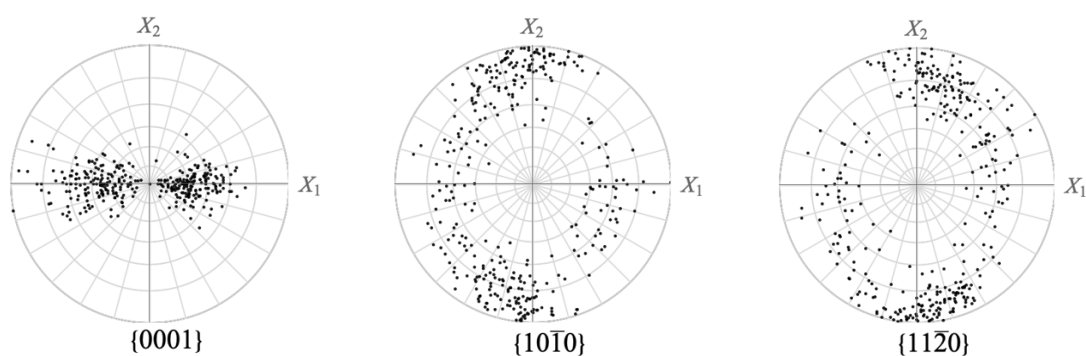


Рисунок 2.2. Полюсные фигуры для начального состояния ПО в расчетах

В качестве нагружения задавалось одноосное растяжение (сжатие) вдоль НП и ПН, которые совпадали по направлению с осями Ox_2 и Ox_1 фиксированной лабораторной системы координат соответственно. Скорость деформации принималась равной $6.67 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ [161]. Алгоритм реализации одноосного нагружения для статистической КМ описан в разделе 2.2.

На рисунке 2.3 приведены зависимости модуля единственной нетривиальной компоненты макронапряжений $|K_{11}| (|K_{22}|)$ в базисе ЛСК от

модуля компоненты логарифмической меры деформации $|H_{11}|(|H_{22}|)$ для одноосного растяжения (сжатия) по соответствующим направлениям.

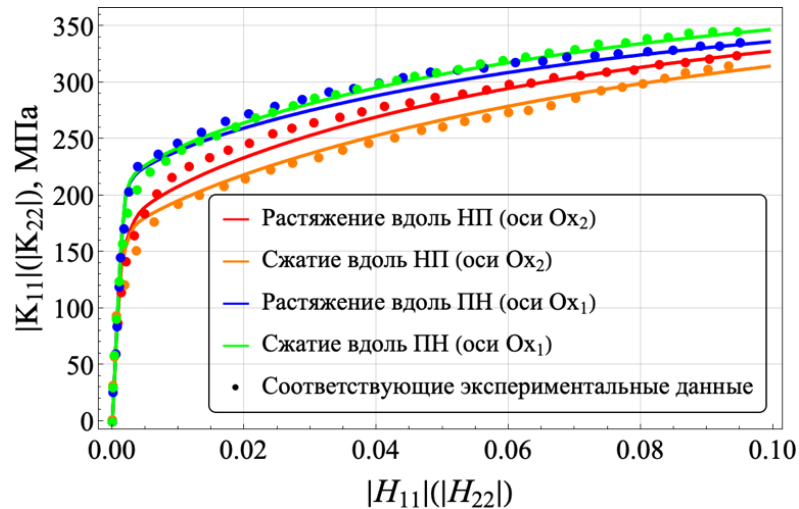


Рисунок 2.3. Зависимости модуля компоненты макронапряжений $|K_{11}|(|K_{22}|)$ в базисе ЛСК от модуля компоненты логарифмической меры деформации $|H_{11}|(|H_{22}|)$ для растяжения (сжатия) по соответствующим направлениям, получаемые при использовании модели (сплошные) и экспериментальные данные (пунктир), представленные в [161]

Полученные результаты моделирования находятся в удовлетворительном соответствии с данными эксперимента [161], что свидетельствует о способности КМ описывать анизотропию пластических свойств на макроуровне, обусловленную начальной текстурой, в рассмотренном диапазоне деформаций. Незначительные отклонения от экспериментальных данных могут быть связаны с неточным заданием начальной текстуры. Отметим, что задание начальной текстуры, точно соответствующей имеющейся в образце, затруднено вследствие сложности экспериментального ее определения, а также сложности задачи построения функции распределения ориентаций кристаллитов, которая будет соответствовать экспериментальным полюсным фигурам для всех направлений (по своей сути эта задача относится к классу обратных).

Далее приведено краткое описание методики численной оценки устойчивости многоуровневых КМ, а также полученные результаты по анализу устойчивости двухуровневой КМ неупругого деформирования ГПУ-

поликристалла с помощью численного и аналитического подхода, основанного на первом методе Ляпунова. Более подробно с алгоритмом оценки устойчивости КМ для ГПУ-поликристалла и полученными по нему результатами можно ознакомиться в работе [155].

В рамках численной методики оценки устойчивости многоуровневых конститутивных моделей [158] изначально необходимо определить базовые решения – решения без возмущений, для которых будет исследоваться устойчивость. В качестве базовых целесообразно выбирать решения краевых задач, моделирующих реальные технологические процессы термомеханической обработки. Для выбранных базовых решений производятся возмущения входных данных (начальных условий и воздействий) и параметров оператора, при этом возможно производить исследования как к возмущениям в начальный, так и в произвольный моменты времени, а также анализировать устойчивость при возмущениях в ходе всего процесса деформирования. При проведении комплексного анализа устойчивости необходимо составить программу экспериментов, в которой учитываются ключевые для рассматриваемого термомеханического процесса возмущаемые параметры модели и моменты времени реализуемых возмущений. При этом в программе рассматриваются как возмущения отдельных параметров, так и их совокупности. Для каждого эксперимента из составленной программы и для каждого типа выбранных для исследования базовых решений производится серия вычислительных экспериментов при разных диапазонах возмущения с большим числом реализаций модели для каждого диапазона. Для анализа выполнения условий устойчивости в расчетах необходимо вычислить относительные значения следующих норм [158]:

$$\begin{aligned}
 & \text{– отклонений историй воздействия} \quad \frac{\| \mathbf{X}_{t \in [0, T]}^* - \mathbf{X}_{t \in [0, T]} \|_{Q_2^m}}{\| \mathbf{X}_{t \in [0, T]} \|_{Q_2^m}} = \Delta_{\mathbf{X}}; \\
 & \text{– отклонений параметров оператора} \quad \frac{\| \mathbf{\Lambda}_{t \in [0, T]}^* - \mathbf{\Lambda}_{t \in [0, T]} \|_{Q_2^s}}{\| \mathbf{\Lambda}_{t \in [0, T]} \|_{Q_2^s}} = \Delta_{\mathbf{\Lambda}};
 \end{aligned}$$

$$- \text{отклонений решения} \frac{\| \mathbf{Y}_{t \in [0, T]}^* - \mathbf{Y}_{t \in [0, T]} \|_{C_{L^2}^n}}{\| \mathbf{Y}_{t \in [0, T]} \|_{C_{L^2}^n}} = \Delta_Y.$$

Согласно критерию устойчивости [158] базовое решение будет устойчиво, если для любого $\varepsilon > 0$ найдутся такие δ -окрестности начальных условий, воздействий и параметров оператора, что при нахождении соответствующих возмущаемых характеристик в них получаемые в модели возмущенные решения будут находиться в ε -окрестности базового решения.

На рисунке 2.4 приведены относительные оценки норм Δ_X , Δ_A , Δ_Y , полученные в реализациях вычислительных экспериментов для сложного нагружения в ходе эксперимента с совместным возмущением компонент **L** и критических напряжений сдвигов последовательными всплесками на всем интервале времени $t \in [0; T]$ [155].

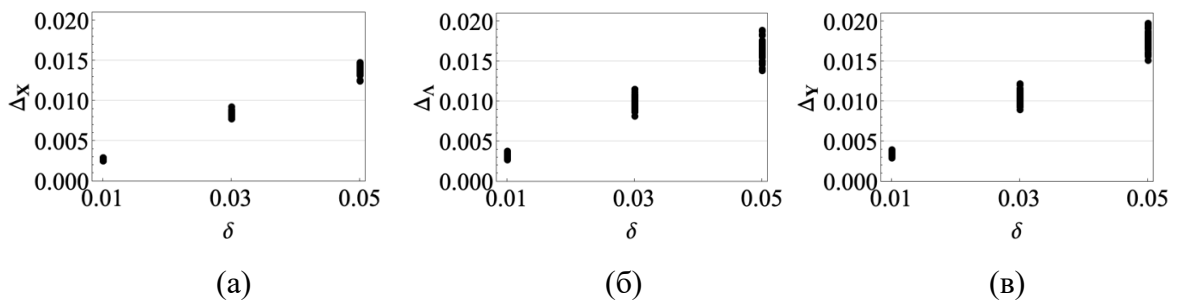


Рисунок 2.4. Зависимость а) Δ_X , б) Δ_A , (в) Δ_Y от диапазона относительного возмущения параметров для сложного нагружения в ходе эксперимента с совместным возмущением компонент **L** и критических напряжений сдвигов последовательными всплесками на всем интервале времени $t \in [0; T]$

Результаты, приведенные на рисунке 2.4, можно представить в виде зависимостей нормы относительного отклонения отклика от норм относительного отклонения других параметров (входных данных, оператора). На рисунке 2.5 приведены зависимости нормы относительного отклонения отклика от нормы относительного отклонения истории воздействий и нормы относительного отклонения оператора для сложного нагружения в ходе эксперимента с совместным возмущением компонент **L** и критических

напряжений сдвигов последовательными всплесками на всем интервале времени $t \in [0; T]$.

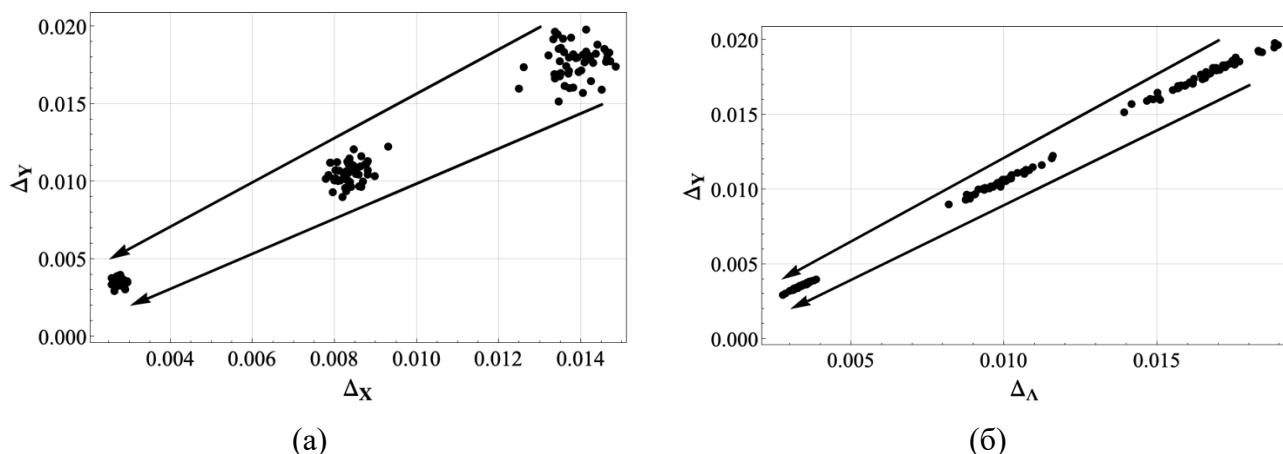


Рисунок 2.5. Зависимость $\Delta\gamma$ от (а) $\Delta\chi$, (б) $\Delta\lambda$ для сложного нагружения в ходе эксперимента с совместным возмущением компонент **L** и критических напряжений сдвигов последовательными всплесками на всем интервале времени $t \in [0; T]$

По полученным результатам можно сделать вывод о том, что рассматриваемая модель обладает заметной чувствительностью к возмущениям кинематических воздействий и критических напряжений сдвигов, что обуславливает необходимость тщательной работы по учету геометрической нелинейности и формулировке законов упрочнения (эволюционных уравнений для критических напряжений сдвигов). Можно заметить, что совместное возмущение параметров приводит к большему отклонению отклика (по средней оценке).

Основным выводом из приведенных результатов с точки зрения анализа устойчивости является тот факт, что при малом возмущении параметров модели (входных данных, оператора) наблюдаются малые отклонения отклика, что, согласно введенному критерию, свидетельствует об устойчивости модели. При уменьшении диапазона возмущения параметров уменьшаются значения всех относительных норм, иначе говоря, при уменьшении нормы воздействий и уменьшении нормы оператора уменьшается и норма отклика, что свидетельствует об устойчивости КМ к рассматриваемым возмущениям. Таким

образом, полученные результаты свидетельствуют об устойчивости предложенной модели с точки зрения введенного определения [158] (строго говоря, важно то, что не выявлены случаи неустойчивости, не обоснованные с позиции учитываемых в модели основных механизмов деформирования), что обуславливает возможность ее применения для описания технологических процессов термомеханической обработки.

Отметим, что представленные выше данные фактически представляют собой результаты анализа чувствительности и к возмущениям отдельных параметров, и к их комбинациям. Можно заключить, что предложенная в [158] методика при практическом применении к численной оценке устойчивости показала: устойчивость двухуровневой конститутивной модели ГЦК-поликристалла, учитывающей ВДС и ротации решеток кристаллитов [153], а также устойчивость двухуровневой конститутивной модели ГПУ-поликристалла, учитывающей ВДС, ротации решеток кристаллитов и двойникование (приведенные выше результаты) [155]. При этом рассматривались весьма разнообразные возмущения различного типа (начальных условий, воздействий, оператора). Очевидно, что в структуре рассмотренных КМ должна быть заложена причина их устойчивости. Обозначим ее далее.

Одним из факторов, позволяющих аналитически обосновать устойчивость рассмотренных статистических КМ, является независимость ВП отдельных кристаллитов друг от друга. Ограничимся для простоты рассмотрением ВДС, т.к. соотношения для двойникования – той же структуры, полученные выводы будут справедливы и для КМ с учетом двойникования.

Применим для анализа первый метод Ляпунова (метод первого приближения). Рассмотрим соотношения мезоуровня для возмущенного решения $\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}$ (где $\mathbf{k}$ – базовое решение, удовлетворяющее КМ, $\delta\mathbf{k}$ – возмущение решения) с позиций наблюдателя в ПСК [63]; этот наблюдатель вращается со спином ω , компоненты тензора упругих свойств $\mathbf{\Pi}_{(cor)}$ постоянны,

как и кристаллографические направления $\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ для всех систем скольжения.

Имеем

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}) = \mathbf{n}_{(cor)} : \left(\mathbf{I} - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\mathbf{k} + \delta\mathbf{k})}{\tau_c^{(k)}} \right)^m \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \right), \quad (2.17)$$

где суммирование ведется только по активным системам скольжения.

Мы предполагаем, что какие-то из возможных возмущений параметров КМ привели к тому, что в текущий момент времени t_0 наблюдается некоторое отклонение $\delta\mathbf{k}(t_0)$ от решения без возмущений $\mathbf{k}(t_0)$ для этого момента. Надо выяснить, будет ли $\delta\mathbf{k}$ затухать с течением времени.

Разложим $(\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}))^m$, m – целое в ряд Маклорена (Тейлора) вблизи $\delta\mathbf{k} = \mathbf{0}$:

$$\begin{aligned} (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}))^m &= (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}))^m \Big|_{\delta\mathbf{k}=\mathbf{0}} + \\ &+ \frac{d(\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\mathbf{k} + \delta\mathbf{k}))^m}{d\delta\mathbf{k}} \Big|_{\delta\mathbf{k}=\mathbf{0}} : \delta\mathbf{k} + \dots \\ &= (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k})^m + m (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k})^{m-1} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \delta\mathbf{k} + \dots \end{aligned} \quad (2.18)$$

Оставляя в (2.17) только два первых слагаемых из разложения (2.18) и исключая соотношение типа (2.17) для базового решения $\mathbf{k}$, получаем соотношение для возмущения $\delta\mathbf{k}$:

$$\frac{d}{dt}(\delta\mathbf{k}) = -\mathbf{n}_{(cor)} : \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0 \frac{m (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k})^{m-1} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \delta\mathbf{k}}{\tau_c^{(k)m}} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad (2.19)$$

где суммирование ведется только по активным системам скольжения.

Рассмотрим возмущения $X_j = \mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)} : \delta\mathbf{k}$, тогда для наблюдателя в ПСК уравнение (2.19) можно записать в виде:

$$\begin{aligned} \dot{X}_j &= \mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)} : \frac{d}{dt}(\delta\mathbf{k}) = \\ &= -\mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)} : \mathbf{n}_{(cor)} : \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0 \frac{m (\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \mathbf{k})^{m-1} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \delta\mathbf{k}}{\tau_c^{(k)m}} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\dot{X}_j = - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}_0 \frac{m(\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\kappa})^{m-1}}{\tau_c^{(k)m}} \mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)} : \boldsymbol{\Pi}_{(cor)} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} X_k.$$

Соотношения (2.20) представляют собой систему первого приближения по Ляпунову.

Запишем (2.20) в виде:

$$\dot{X}_j = A_{jk} X_k, \quad (2.21)$$

где коэффициенты матрицы первого приближения

$$A_{jk} = \begin{cases} -H_k \beta_{jk}, & \text{if } \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\boldsymbol{\kappa} + \delta \boldsymbol{\kappa}) \geq \tau_c^{(k)}, \\ 0, & \text{if } \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : (\boldsymbol{\kappa} + \delta \boldsymbol{\kappa}) < \tau_c^{(k)}, \end{cases} \quad (2.22)$$

где $H_k = \dot{\gamma}_0 \frac{m(\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\kappa})^{m-1}}{(\tau_c^{(k)})^m}$, $\beta_{jk} = \mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)} : \boldsymbol{\Pi}_{(cor)} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$, при этом видно, что

$$\beta_{jk} = \beta_{kj}.$$

Исследуя свойства матрицы A_{jk} , можно судить о тенденции решений к устойчивости.

Отметим, что, если активных СС не будет, возмущение останется таким же. Эта ситуация характерна для чистой упругости.

Из (2.22) следует, что возмущения касательных напряжений X_j могут зависеть только от X_k для активных СС. Поэтому резонно рассмотреть сначала весь набор взаимовлияющих активных СС, потом – неактивные СС.

Для случая одной активной СС получим уравнение

$$\dot{X}_j = A_{jj} X_j = -H_j \beta_{jj} X_j \quad (2.23)$$

из которого с учетом положительности H_j и β_{jj} следует тенденция к затуханию возмущения X_j . Безусловно, в общем случае H_k зависит от времени, поэтому здесь следует говорить именно о тенденции (достаточно резонным представляется считать H_k маломеняющимся на рассматриваемых небольших временных интервалах). Вообще говоря, свойство устойчивости скалярного

вязкопластического соотношения (для одной идеально ориентированной системы скольжения) и представляется базой для проявляемой устойчивости трехмерных КМ.

При рассмотрении случая двух и более активных СС необходимо анализировать все собственные числа матрицы A_{jk} . К примеру, для случая трех активных систем скольжения (обозначим их p, q, r соответственно) имеем матрицу первого приближения:

$$[A_{jk}] = - \begin{pmatrix} H_p \beta_{pp} & H_q \beta_{pq} & H_r \beta_{pr} \\ H_p \beta_{qp} & H_q \beta_{qq} & H_r \beta_{qr} \\ H_p \beta_{rp} & H_q \beta_{rq} & H_r \beta_{rr} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} H_p \beta_{pp} & H_q \beta_{pq} & H_r \beta_{pr} \\ H_p \beta_{pq} & H_q \beta_{qq} & H_r \beta_{qr} \\ H_p \beta_{pr} & H_q \beta_{qr} & H_r \beta_{rr} \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Характеристическое уравнение для собственных A_{jk} :

$$\begin{aligned} & -\lambda^3 - (H_p \beta_{pp} + H_q \beta_{qq} + H_r \beta_{rr}) \lambda^2 - \\ & - (H_p H_q (\beta_{pp} \beta_{qq} - \beta_{pq}^2) + H_p H_r (\beta_{pp} \beta_{rr} - \beta_{pr}^2) + H_q H_r (\beta_{qq} \beta_{rr} - \beta_{qr}^2)) \lambda - \\ & - H_p H_q H_r (\beta_{pp} \beta_{qq} \beta_{rr} - \beta_{pq}^2 \beta_{rr} - \beta_{pr}^2 \beta_{qq} - \beta_{qr}^2 \beta_{pp} + 2 \beta_{pq} \beta_{pr} \beta_{qr}) = 0. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Результаты численных расчетов, проведенных для определения введенных в (2.25) коэффициентов для различного набора трех активных СС (даже случайно ориентированных перпендикулярных $\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}, \mathbf{b}^{(k)} \perp \mathbf{n}^{(k)}$!), подтвердили, что все коэффициенты полинома в левой части (2.25) – отрицательные, откуда следует отрицательность всех собственных чисел A_{jk} , что говорит об устойчивости по первому приближению [166,167]. Аналогичные вычисления были проделаны для случаев 2 и 4 активных систем скольжения, нет сомнений, что результат можно обобщить и для большего числа активных СС.

Для неактивных систем скольжения имеем:

$$\dot{X}_j = - \sum_{\text{by active systems } k} H_k \beta_{jk} X_k, \quad k \neq j,$$

откуда с учетом показанного выше затухания X_k для активных СС следует тенденция к затуханию X_j .

Таким образом, на основе первого метода Ляпунова аналитически показано, что должна наблюдаться тенденция к устойчивости КМ, наблюдаемая в численных расчетах. С физической точки зрения этот факт можно объяснить тем, что увеличение касательного напряжения на СС при возмущении напряжений приводит к возрастанию скорости сдвигов по данной СС, что, в свою очередь, приводит к снижению напряжения, и наоборот.

В приведенном анализе обозначена только основная причина устойчивости – структура вязкопластического определяющего соотношения на основе уравнения Хатчинсона (2.8)₅. При этом ясность выкладок обеспечил прозрачный подход с выделением движения подвижной системы координат [63]; строго говоря, следует провести и анализ устойчивости по отношению к возмущению последнего. Повороты ПСК определяются моделью ротации решетки и устойчивость КМ, безусловно, должна быть обусловлена этой моделью. Для всех физически обоснованных моделей ротации (в частности, модели ротации Тейлора) спин решетки определяется по скоростям сдвигов и кинематическим воздействиям. Таким образом, если соотношения для определения скоростей сдвигов являются устойчивыми, то логично ожидать устойчивость модели ротации. Между тем, рассмотренные соотношения мезоуровня являются базой и для самосогласованных КМ, и для прямых КМ, положительно влияя на их «общую» устойчивость.

2.4. Анализ результатов моделирования нагружений с изломом траектории деформации

Для проверки адекватности базовой КМ помимо проведения анализа устойчивости модели необходима тщательная верификация последней с использованием получаемых с помощью базовых КМ (при одних и тех же параметрах) результатов для различных типов нагружений, а не только для простых, на которых обычно осуществляется идентификация. Особое внимание при этом необходимо обратить на сложные (на макроуровне) нагружения с

изломом траектории деформирования [168,169], которые присущи реальным технологическим процессам обработки металлов давлением. Например, в ходе глубокой вытяжки на определенной стадии происходит смена моды деформирования с чистого сдвига на двуосное растяжение [170]; резкое изменение траектории деформации возникает при РКУП за счет поворотов заготовки в следующих друг за другом проходах [106]. Поэтому необходимо, чтобы многоуровневые КМ описывали эффекты, обнаруживаемые в экспериментах на сложное нагружение. Следует отметить, что наиболее часто для исследования сложного нагружения используются опыты на двухзвенных траекториях деформации с изломом, реализуемые на трубчатых образцах, при этом каждый из двух участков деформирования реализуется простым (пропорциональным) нагружением с разгрузкой между этапами или непрерывным образом. В настоящем разделе будут рассматриваться в основном именно такие нагружения.

Известно, что в большинстве случаев в ходе активного сложного нагружения сразу после излома траектории деформации происходит понижение интенсивности напряжений σ_n (эффект «нырка» напряжений) на кривой деформирования (зависимости σ_n от интенсивности накопленной деформации ε_n), и затем интенсивность напряжений (обычно плавно) стремится вернуться к значениям, соответствующим простому нагружению [168,169,171]. Однако в других случаях сразу после «нырка» интенсивности напряжений происходит ее резкое увеличение с превышением предшествующего излому значения [169]. В некоторых случаях вслед за точкой излома траектории деформации кривая $\sigma_n - \varepsilon_n$ после определенной деформации выходит на аналогичную кривую, соответствующую простому нагружению по моде деформации второго этапа, что можно трактовать как проявление эффекта затухания памяти материала [172] (или запаздывания скалярных и векторных свойств [173]). Для краткости выход и на пониженную, и на повышенную интенсивность напряжений после излома будем называть эффектом разрыва монотонности кривой деформирования $\sigma_n -$

$\varepsilon_{и}$ после излома траектории деформации. Для алюминия и его сплавов исследования влияния изменения траектории нагружения на отклик рассматривались во множестве работ, например, в [174–176].

Следует отметить, что для некоторых материалов после точки излома значения интенсивности напряжений кривой $\sigma_{и} - \varepsilon_{и}$ превышают значения $\sigma_{и}$ аналогичной кривой, построенной для простого нагружения по моде деформации второго участка. Такое поведение получило название эффект перекрестного упрочнения (в зарубежной литературе – «cross-hardening effect») [177–179]. Существуют многочисленные экспериментальные подтверждения эффекта перекрестного упрочнения для различных материалов и видов нагружений, например, для технически чистой меди [180], алюминия и его сплавов [181–183], сталей [182]. Можно отметить, что эти натурные эксперименты проводились не при непрерывном активном нагружении, а с разгрузкой между этапами (это связано с невозможностью экспериментальной реализации непрерывных нагружений рассматриваемых типов, например, последовательностей прокатки и растяжения).

В работах экспериментального характера [179,182] наиболее частое объяснение эффекта перекрестного упрочнения основано на анализе взаимодействия дислокаций. В ходе нагружения на первом этапе выстраивается определенная дислокационная субструктура; при изменении траектории деформирования дислокации начинают двигаться по новым системам скольжения, которые могут пересекать созданные на первом этапе структурные образования, для преодоления которых необходимы бóльшие напряжения, чем при монотонном нагружении. В [183] отмечается, что для металлов с низкой энергией дефекта упаковки эффект изменения интенсивности напряжений при смене траектории нагружения менее выражен, чем для металлов с высокой энергией дефекта упаковки. Вероятно, это можно объяснить тем, что в материалах с низкой ЭДУ в результате взаимодействия дислокаций как активных, так и неактивных СС образуются прочные барьеры типа Ломера-

Коттрелла, упрочняющие равным образом и те, и другие СС. В работе [80] приводятся результаты моделирования характерных для РКУП нагружений с изломом траектории деформации с помощью модифицированной модели ЕТМВ [37,93], в соотношениях которой учитывается изменение эволюции плотностей дислокаций при смене направления деформирования.

В настоящем разделе показано, что базовая двухуровневая статистическая КМ применима для описаний эффектов, возникающих при нагружениях с изломом траектории деформирования. Подробно результаты проведенного исследования отражены в [154].

В рамках решения задачи моделирования нагружений с изломом траектории деформации используются два вида закона упрочнения (2.8)₇:

- анизотропный закон упрочнения [151,184]:

$$\begin{aligned}\dot{\tau}_c^{(k)} &= \sum_{l=1}^K h^{(kl)} |\dot{\gamma}^{(l)}|, \\ h^{(kl)} &= [q_{lat} + (1 - q_{lat})\delta^{kl}] h^{(l)}, \\ h^{(l)} &= h_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_{sat} \right|^a,\end{aligned}\tag{2.26}$$

- изотропный степенной закон упрочнения:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = AB \dot{\Gamma}^{B-1},\tag{2.27}$$

где $h^{(kl)}$ – матрица, характеризующая влияние системы скольжения l на упрочнение по системе скольжения k , q_{lat} – параметр латентного упрочнения, δ^{kl} – дельта Кронекера, τ_{sat} – напряжение насыщения, h_0 , a – параметры закона упрочнения (находятся в процедуре идентификации по экспериментальным данным), A , B – параметры степенного закона упрочнения, $\dot{\Gamma} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)}$ –

интегральная оценка скорости пластического сдвига. Стоит отметить, что описание возможной аннигиляции дислокаций и реверсивных нагружений, при которых активная на первом этапе СС может быть активирована в противоположном направлении, в предложенном законе упрочнения не

рассматривалось. Приведенный анизотропный закон упрочнения (2.26) имеет простую математическую формулировку. Отметим, что существуют другие методы для корректного описания эффектов при нагружениях с изломом траектории деформации, например, если не использовать предположение об удвоенном числе систем скольжения, что является вычислительно эффективным, модель дополняется уравнениями для описания кинематического упрочнения [185]. Кроме того, для склонных к двойникованию материалов описание нагружений с изломом траектории деформации является более сложным, так как двойникование существенно влияет на упрочнение и в материале при изменении траектории нагружения может реализовываться раздвойникование [186], которое нужно учитывать в модели.

В некоторых работах для описания рассматриваемого эффекта перекрестного упрочнения были предложены сложные законы упрочнения, в которых критические напряжения на системах скольжения определяются суммой слагаемых, отвечающих за различные механизмы упрочнения. В работе [181] в отличие от (2.26) явно не рассматривается влияние каждой активной СС на упрочнение по другим СС, для всех принимается зависимость упрочнения от суммарной скорости сдвигов с коэффициентом, который для неактивных систем скольжения существенно больше. Таким образом реализуется дополнительное латентное упрочнение на неактивных СС. В [178] авторами предложены сложные эволюционные соотношения для отдельных слагаемых, определяемых по векторам сдвигов для учета взаимодействия различных систем скольжения. Закон упрочнения (2.26) выбран по причине более простой реализации и прозрачного физического смысла. Этот закон часто применяется для моделирования деформирования образцов из алюминия при монотонных нагружениях [187,188].

Результаты расчетов, полученные с использованием (2.26), свидетельствуют о возможности корректного описания эффекта перекрестного упрочнения при задании значения параметра латентного упрочнения $q_{lat} = 2$.

Обычно в КМ ФТП принимается $q_{lat} = 1.4$ для учета того, что при активном сдвиге по некоторой СС препятствия для неактивных СС создаются интенсивней, чем для нее самой [30]. Заметим, что широко используемое значение параметра $q_{lat} = 1.4$ было получено эмпирически для монотонных нагружений. Конечно, и при других значениях q_{lat} можно идентифицировать другие параметры модели так, чтобы обеспечить соответствие экспериментальным данным. Вообще говоря, исследователи часто указывают на то, что коэффициент латентного упрочнения (для конкретики – на начальной стадии неупругого деформирования), в том числе при сложном нагружении, в действительности может находиться в широком диапазоне. В работе [178] отмечено, что при любом разумном законе латентного упрочнения можно описывать монотонные нагружения и эволюцию текстуры, но понимание правильности модельного учета латентного упрочнения появляется после описания нагружений с изломом траектории деформации. В [152] вместе с типичным значением латентного упрочнения $q_{lat} = 1.4$ исследуется случай $q_{lat} = 3$; полученные результаты расчетов показывают, что поведение модели при разных значениях параметра латентного упрочнения является похожим. Отметим, что в общем случае для описания эффектов типа перекрестного упрочнения действительно резонно использовать более детальные законы упрочнения, например, в явном виде описывающие эволюцию плотностей дислокаций по системам скольжения и учитывающие, в частности, энергию дефекта упаковки, но в этом случае КМ усложняется – становится трехуровневой [64].

Для идентификации параметров модели использовались экспериментальные данные для кривой растяжения образцов из алюминия, приведенные в [189].

Представительный макрообъем моделируется выборкой из 343 кристаллитов, начальное распределение ориентаций которых принималось

равномерным. В таблице 2.2 содержатся материальные константы и параметры закона упрочнения, определенные в ходе идентификации.

Таблица 2.2. Параметры КМ для алюминия

**В таблице использованы сокращения: аниз. – анизотропное упрочнение, из. – изотропное упрочнение*

Π_{1111}	Π_{1122}	Π_{1212}	$\dot{\gamma}_0$	m	τ_{c0} аниз.	τ_{c0} из.
106.75 ГПа [190]	60.41 ГПа [190]	28.34 ГПа [190]	10^{-3} с^{-1} [190]	50 [190]	6 МПа	3 МПа
q_{lat}	τ_{sat}		h_0	a	A	B
2	34 МПа		115 МПа	2.25	29 МПа	0.4

Рассматривалось кинематическое нагружение вдоль оси Ox_1 ЛСК с градиентом скорости: $\mathbf{L}(t) = \dot{\epsilon} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3$ и скоростью деформации $\dot{\epsilon} = 0.0017 \text{ с}^{-1}$, $\mathbf{p}_i$, $i = 1, 2, 3$ – базис ЛСК. В [184] это нагружение было предложено для статистической КМ как аппроксимация одноосного растяжения – интенсивность расчетных напряжений получается близкой к одноосным напряжениям в натурном эксперименте. Для краткости будем называть это кинематическое нагружение «квазиодноосным растяжением». Отметим, что вследствие начальной изотропии образца при квазиодноосном растяжении вдоль любой из трех осей будут получаться одинаковые результаты. На рисунке 2.6 приведены зависимости интенсивности напряжений $\sigma_M = \sqrt{3/2 \mathbf{S} : \mathbf{S}}$, $\mathbf{S} = \mathbf{K} - 1/3 I_1(\mathbf{K}) \mathbf{I}$ от интенсивности накопленных деформаций [80,149]

$$\epsilon_M = \int_0^t \sqrt{2/3 \mathbf{D}_{dev}(t) : \mathbf{D}_{dev}(t)} dt, \mathbf{D}_{dev}(t) = \mathbf{D}(t) - 1/3 I_1(\mathbf{D}(t)) \mathbf{I}, \mathbf{D}(t) = \frac{1}{2} (\mathbf{L}(t) + \mathbf{L}^T(t))$$

, полученные для квазиодноосного растяжения в расчетах при использовании двух видов закона упрочнения и при растяжении вдоль Ox_1 в натурном эксперименте [189].

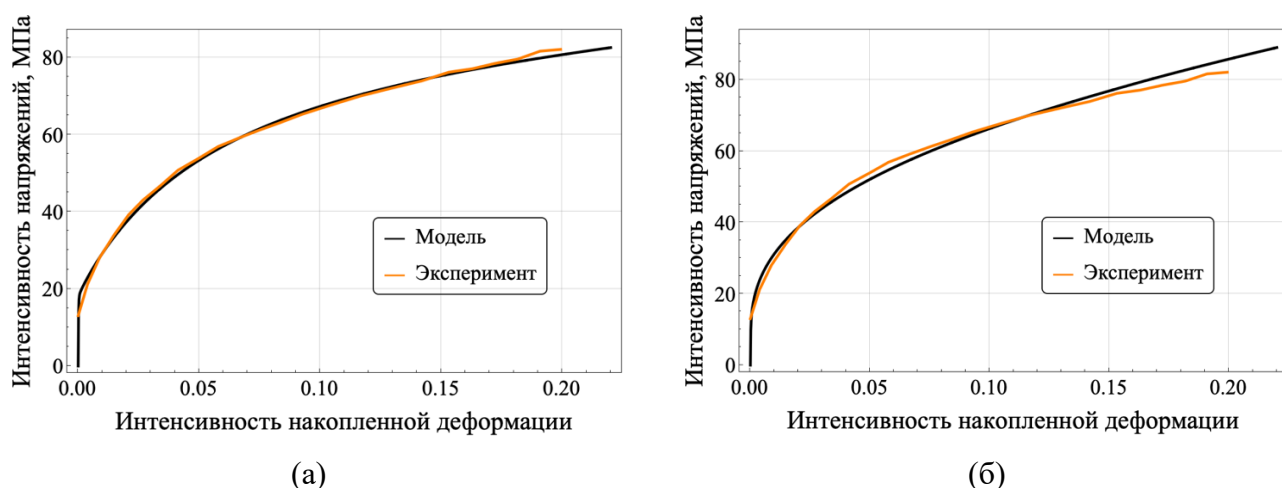


Рисунок 2.6. Зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для результатов моделирования для квазиодноосного растяжения вдоль оси Ox_1 при (а) анизотропном, (б) изотропном степенном законе упрочнения и для экспериментальных данных при растяжении вдоль Ox_1 [189]

Из рисунка 2.6 видно, что результаты моделирования находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными [189] при рассматриваемых деформациях. Заметим, что при увеличении интенсивности деформаций степенной закон упрочнения едва ли будет соответствовать экспериментальным данным, так как он не учитывает насыщение при упрочнении. В диссертационной работе он использовался для тестовых расчетов при небольших деформациях; для описания реальных процессов термомеханической обработки при больших деформациях необходимо использовать анизотропный закон упрочнения вида (2.26) или более сложные.

Далее приведено краткое описание и анализ некоторых результатов моделирования процессов нагружения с изломом траектории деформации с использованием двухуровневой КМ. Рассматриваются кинематические нагружения, приближенно описывающие прокатку и растяжение, простой сдвиг, а также двухэтапные последовательности из них. Для определения угла излома траектории деформации между этапами используется мера, предложенная в работе [191]:

$$\cos \phi_D = \frac{\mathbf{L}_1 : \mathbf{L}_2}{\|\mathbf{L}_1\| \|\mathbf{L}_2\|}, \quad (2.28)$$

где $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\mathbf{A} : \mathbf{A}^T}$ – норма тензора.

Для удобства изложения результатов опишем рассматриваемые программы нагружений с изломом траектории деформации:

1) Растяжение–прокатка. Для сопоставления результатов моделирования и экспериментальных данных по нагружениям с изломом траектории деформации рассматривались квазиодноосное растяжение вдоль оси Ox_3 и последующая прокатка вдоль оси Ox_1 , моделируемая растяжением вдоль оси Ox_1 и сжатием вдоль Ox_2 . Для аппроксимации прокатки используется кинематическое нагружение с градиентом скорости $\mathbf{L}(t) = \dot{\epsilon} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 - \dot{\epsilon} \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2$. Отметим, что такое же приближение при рассмотрении умеренных деформаций, задаваемое через деформационный градиент, используется в [192].

2) Прокатка–растяжение. Нагружения задаются аналогично программе 1, но в обратном порядке, на первом этапе рассматривается прокатка, а на втором – квазиодноосное растяжение вдоль оси Ox_3 .

3) Растяжение–сдвиг. Рассматривалось квазиодноосное растяжение вдоль оси Ox_3 и кинематическое нагружение простым сдвигом с градиентом скорости $\mathbf{L}(t) = \dot{\epsilon} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2$.

4) Сдвиг–растяжение. Нагружения задаются аналогично программе 3, но в обратном порядке, на первом этапе рассматривается простой сдвиг, а на втором – квазиодноосное растяжение вдоль оси Ox_3 .

Для всех программ нагружений 1–4 угол излома (2.28) составляет $\phi_D = 90^\circ$. Отметим, что для всех приведенных выше нагружений эволюция текстуры не рассматривалась, так как в исследуемом диапазоне деформаций она формируется в такой степени, что нет возможности достоверно оценить её отличие от равномерного распределения.

На рисунке 2.7 приведены зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для программ нагружений 1 (слева) и 2 (справа) при анизотропном законе упрочнения (2.26) без разгрузки.

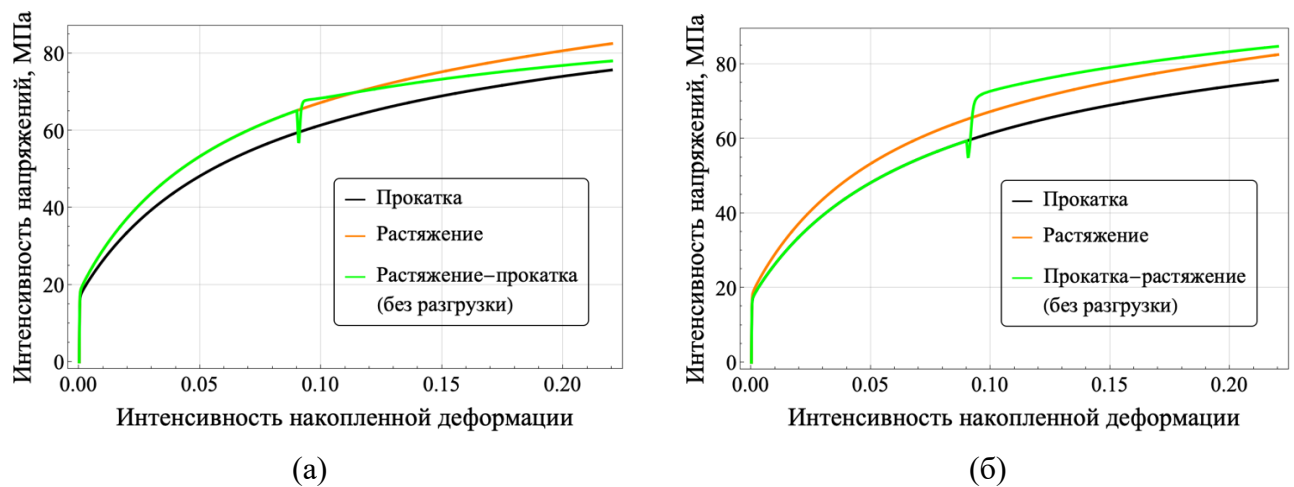


Рисунок 2.7. Зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для программ нагружений 1 (а) и 2 (б) при анизотропном законе упрочнения без разгрузки

Видно, что в обоих случаях наблюдается «нырок» напряжений. При нагружении по программе 2 (прокатка–растяжение) после «нырка» происходит резкое повышение интенсивности напряжений, которая выходит на значения выше, чем для монотонного растяжения (реализуется эффект перекрестного упрочнения). При реализации программы 1 (растяжение–прокатка) превышение интенсивности напряжений на втором этапе (прокатка) интенсивности при монотонном растяжении (рисунок 2.7а) объясняется значительным изменением траектории деформации ($\phi_D = 90^\circ$) при существенном латентном упрочнении ($q_{lat} = 2$).

В некоторых случаях опыты на нагружения с изломом траектории деформации проводятся с разгрузкой, следовательно, для сопоставления с экспериментальными данными необходимо проанализировать рассматриваемые сложные нагружения с учетом разгрузки. В рамках модели разгрузка задавалась как процесс деформирования до близкого (с заданной погрешностью) к нулевому значению интенсивности макронапряжений при нагружении с градиентом

скорости $\mathbf{L}(t) = -\alpha \mathbf{K}(t)$, где $\alpha = 2 \cdot 10^{-4}$ (МПа·с)⁻¹. На рисунке 2.8 приведены зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для программ нагружений 1 и 2 при анизотропном законе упрочнения с разгрузкой и экспериментальные данные при растяжении вдоль оси Ox_3 после предварительной прокатки [189].

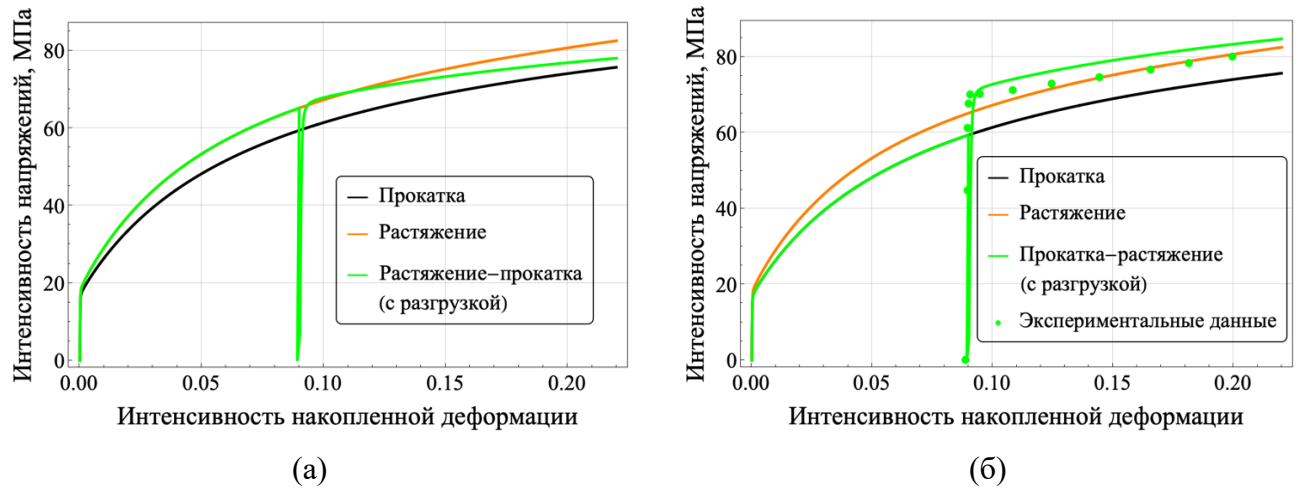


Рисунок 2.8. Зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для программ нагружений 1 (а) и 2 (б) при анизотропном законе упрочнения с разгрузкой и экспериментальные данные при растяжении вдоль оси Ox_3 после предварительной прокатки [189]

Из рисунка 2.8 видно, что результаты моделирования при нагружении с изломом траектории деформации находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными [189] по уровню напряжений после смены траектории деформации. Таким образом, рассматриваемая статистическая КМ (2.8) способна описывать эффект перекрестного упрочнения при использовании простых законов упрочнения. Отметим, что отличия в результатах с численными экспериментами без разгрузки (рисунок 2.7) наблюдаются только вблизи точки излома траектории деформации. Показано, что для случаев с разгрузкой и без разгрузки наблюдаются незначительные отличия в реализации сдвигов по СС, которые несущественно влияют на отклик на макроуровне. Для описания в модельных результатах экспериментально наблюдаемого разупрочнения (см. рисунок 2.8б) необходимо заложить данный механизм в закон упрочнения.

Двухуровневая КМ ФТП позволяет проанализировать, как реализуется ВДС в кристаллитах.

На рисунке 2.9 приведены зависимости доли кристаллитов с определенным числом активных по критерию Шмида систем скольжения, определенных с помощью модели для процессов деформирования по программам 1 и 2, от интенсивности накопленных деформаций. Скачкообразные зависимости обусловлены частой сменой активных СС (осреднение по временным интервалам не проводилось).

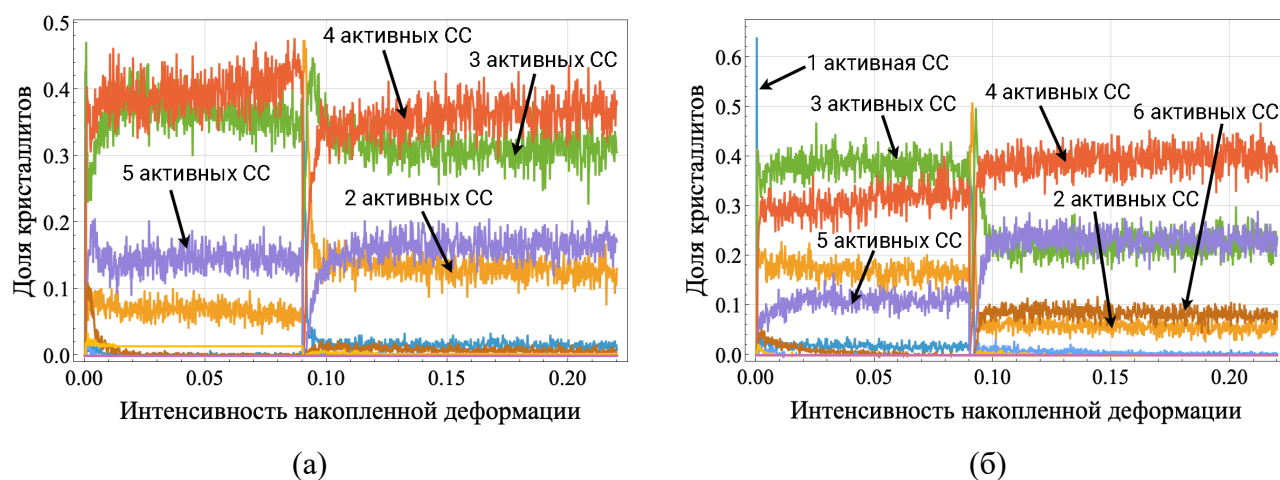


Рисунок 2.9. Зависимости доли кристаллитов с указанным числом активных по критерию Шмида систем скольжения от интенсивности накопленных деформаций для программ нагружений 1 (а) и 2 (б) при анизотропном законе упрочнения без разгрузки

Из приведенных на рисунке 2.9 данных следует, что при прокатке (второй этап нагружения по программе 1, первый этап нагружения по программе 2) реализуется меньше активных СС, чем при растяжении (первый этап нагружения программы 1, второй этап нагружения программы 2).

В работе [154] для объяснения возникающих эффектов при рассмотренных нагружениях были подробно проанализированы оценки расположения изображающей точки в пространстве напряжений (ИТН) на поверхности текучести (ПТ) кристаллитов до излома траектории деформации и после. Стоит отметить, что при программе нагружения 1 (растяжение–прокатка) на втором этапе нагружения распределение кристаллитов по классам интенсивности

напряжений происходит таким образом, что доля кристаллитов с высокой интенсивностью напряжений снижается, а при программе 2 (прокатка–растяжение), наоборот, повышается. Результаты такого поведения ИТН на ПТ объясняют повышение/понижение интенсивности напряжений макроуровня на рисунке 2.7.

Для полноты анализа в работе [154] были рассмотрены программы нагружения 1, 2 при использовании изотропного степенного закона упрочнения (2.27) и показано, что в отличие от анизотропного закона упрочнения кривая при программе нагружения 1 (растяжение–прокатка) на втором этапе деформирования почти сразу после момента излома выходит на кривую для монотонного нагружения, что свидетельствует о выполнении принципа затухающей памяти. Для случая изотропного упрочнения при таких же воздействиях был проведен численный эксперимент с разгрузкой и осуществлен анализ поведения ИТН на ПТ кристаллитов. Полученные результаты качественно согласуются с соответствующими результатами для анизотропного упрочнения.

Аналогичный анализ был проведен для программ нагружений 3, 4, результаты которого качественно соответствуют данным для программ нагружений 1, 2. Таким образом, из полученных результатов в [154] следует, что отличия в поведении ИТН на ПТ кристаллитов для программ 1, 2 (3, 4) вызваны различиями в эволюции внутренней дефектной структуры при разных нагружениях, что, в свою очередь, приводит к «переходам» между кривыми деформирования для данных нагружений.

Таким образом, по результатам проведенных исследований показано, что базовая двухуровневая статистическая КМ является устойчивой к возмущениям различной природы и способна адекватно описывать нагружения с изломом траектории деформации. Следовательно, разработанную ранее базовую КМ можно применять для описания реальных технологических процессов с учетом моделирования дополнительных физических механизмов деформирования, в

частности, процесса фрагментации зерен. Описанию построения таких расширенных многоуровневых КМ на основе базовой двухуровневой посвящены главы 3 и 4.

3. Интеграция в базовую двухуровневую конститутивную модель модифицированной подмодели для приближенного описания фрагментации зерен

В данной главе содержится описание соотношений подмодели ЕТМВ для приближенного учета реализующихся в ходе фрагментации изменений структуры. Предложены модификации базовых соотношений для более адекватного описания процесса измельчения в ходе ИПД. Приведены результаты применения модели и их анализ для различных технологических процессов, которые отражены в работах [146,156].

Модель ЕТМВ [37,93] позволяет предсказывать эволюцию средних характеристик дислокационных ячеек (размеров, плотностей дислокаций в них и их границах) в каждом зерне при деформировании. В [193] отмечено, что дислокационная ячеистая структура является «прекурсором» финальной зеренной структуре, формируемой при очень больших деформациях в ходе ИПД. С этой точки зрения модель ЕТМВ является хорошей базой для построения более детализированных моделей фрагментации, включающих учет размеров фрагментов и зерен, а также разворотов фрагментов, описанию которой посвящена глава 4. С другой стороны, модель ЕТМВ в исходном виде или с незначительной корректировкой вида уравнений может применяться и для моделирования ИПД (например, [13,14]), в этом случае в ней упомянутые процессы учитываются эффективно в феноменологических зависимостях параметров модели от накопленной деформации, прямо аппроксимирующих экспериментальные данные.

Для учета влияния характеристик внутренней структуры на напряженно-деформированное состояние кристаллитов в КМ в качестве соотношения (2.8) использовался закон упрочнения, в котором критические напряжения представляются суммой слагаемых, отражающих влияние различного рода препятствий на скольжение дислокаций [91]:

$$\begin{aligned}
\tau_c^{(k)} &= \tau_{c0}^{(k)} + \tau_{cMHP}^{(k)} + \tau_{cBH}^{(k)}, \\
\tau_{cMHP}^{(k)} &= k_{MHP} / l, \quad k_{MHP} = \alpha_{MHP} K_r G b, \\
\tau_{cBH}^{(k)} &= \sum_{i=1}^K \Omega^{(ki)} \alpha_{BH} G b \sqrt{\rho^{(i)}},
\end{aligned} \tag{3.1}$$

где $\tau_{c0}^{(k)}$ – начальное критическое напряжение для системы скольжения k , (3.1)₂ – модифицированное соотношение Холла–Петча [14,34,97,98,194], l – средний размер ячейки (определяется с помощью модели ЕТМВ), α_{MHP} – константа, K_r – в исходной модели ЕТМВ константа, в модифицированной зависит от деформаций (соотношение (3.17)), G – модуль сдвига, b – модуль вектора Бюргерса, (3.1)₃ – соотношение, аналогичное предложенному Бейли и Хиршем [127,195,196], учитывающее взаимодействие дислокаций, $\Omega^{(ki)}$ – компоненты матрицы взаимодействия дислокаций на системе скольжения с номером k с дислокациями на системе скольжения с номером i (принимают значения 1 для компланарных систем скольжения и q_{lat} для некомпланарных систем скольжения), α_{BH} – параметр Бейли–Хирша, $\rho^{(i)}$ – плотность дислокаций на системе скольжения с номером j , в диссертационной работе принимается, что плотность дислокаций на всех системах скольжения одинаковая $\rho^{(i)} = \frac{\rho}{K/2}$, где суммарная плотность дислокаций ρ определяется с помощью модели ЕТМВ. Поскольку возврат не является значимым для материалов с низкой/средней энергией дефекта упаковки при комнатной температуре [25], его влиянием в законе упрочнения (3.1) пренебрегается.

3.1. Описание концепции, базовых и модифицированных соотношений модели ЕТМВ

В рамках модели ЕТМВ в каждом зерне поликристалла рассматривается эффективная (средняя) ячейка с характеристиками, соответствующими осредненным по всем входящим в рассматриваемое зерно ячейкам (рисунок 3.1).

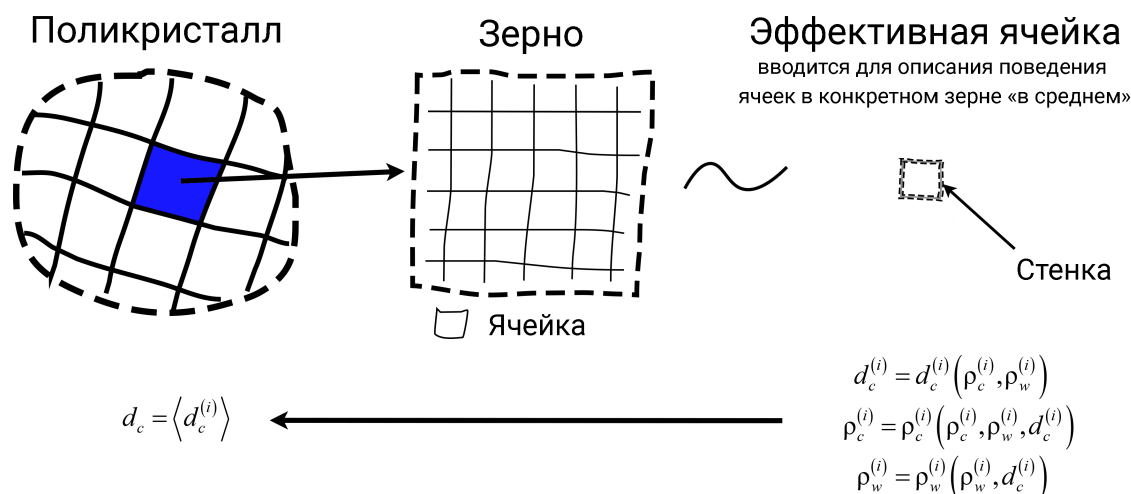


Рисунок 3.1. Схема модели ETMB

Каждая эффективная ячейка представляется составной двухфазной структурой [93]. Первой фазой являются «твердые» стенки ячейки, а второй – «мягкие» внутренности ячейки. При этом авторы исходной модели отмечают, что впервые идея о том, что ячейки можно рассматривать в таком виде, была предложена в работе [35]. Здесь под «твердостью»/«мягкостью» понимается степень препятствия для движения дислокаций, то есть «твердые» стенки ячейки сильнее препятствуют скольжению по сравнению с «мягкими» внутренностями. Поэтому стенкой и внутренностью ячейки называют области с высокой и низкой локальной плотностью дислокаций соответственно.

Стоит отметить, что одно из основных предположений двухфазной композитной модели [37], состоит в том, что дислокационная ячеистая структура уже сформирована (вопрос описания формирования обсуждается, к примеру, в статьях [25,197,198]), поэтому стоят задачи идентификации ее параметров на основе данных эксперимента (или результатов моделей, описывающих формирование ячеистой структуры) и описания ее эволюции при деформировании.

В исходной модели [93] принимается, что ячейка имеет кубическую форму со стороной куба равной l и толщиной стенки, равной $w/2$. Начальное значение l определяется по начальному значению плотности дислокаций в стенках и внутренностях ячеек с использованием формул, приведенных ниже.

Идея модели ЕТМВ – в описании эволюции плотности дислокаций во внутренностях и стенках ячейки, затем определении по ним с использованием правила смесей эффективной плотности дислокаций. С последней по феноменологическому соотношению связывается размер ячейки (описание изменения которого и является целью применения модели ЕТМВ). В п. 1 представлены соотношения исходной модели ЕТМВ, в п. 2 описаны используемые известные усовершенствования соотношений. В диссертационной работе модифицированная модель ЕТМВ интегрирована в двухуровневую КМ, с использованием этого аппарата получены новые результаты для равноканального углового прессования меди (раздел 3.2) и холодной гибки листа стали 08Х18Н10 (раздел 3.3).

1. Соотношения базовой модели ЕТМВ

Как отмечено выше, в рассматриваемой модели предполагается, что плотность дислокаций на всех системах скольжения одинаковая $\rho^{(i)} = \frac{\rho}{K/2}$, где ρ определяется для ячейки по правилу смесей. Обозначим через ρ_c плотность дислокаций во внутренности ячейки, ρ_w – плотность дислокаций в стенках ячейки. Для определения изменения величины ρ_c используется эволюционное соотношение [93]:

$$\dot{\rho}_c = (\dot{\rho}_c)_{FR}^+ + (\dot{\rho}_c)_w^- + (\dot{\rho}_c)_{cs}^-. \quad (3.2)$$

Первое слагаемое в правой части (3.2) характеризует увеличение плотности дислокаций во внутренности ячейки за счет их генерации источниками Франка-Рида, находящимися вблизи стенок [93]:

$$(\dot{\rho}_c)_{FR}^+ = \frac{\alpha^*}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{\rho_w}}{b} \dot{\gamma}_w, \quad (3.3)$$

где α^* – константа, характеризующая долю активных источников генерации дислокаций, $\dot{\gamma}_w$ – скорость сдвига за счет скольжения дислокаций в стенке, определяемая уравнением Орована $\dot{\gamma}_w = \rho_w b v_w$, v_w – средняя скорость

скольжения дислокаций в стенках ячейки. Заметим, что в (3.3) используется скорость сдвига для дислокаций в стенке; согласно [93] источники Франка-Рида, находящиеся вблизи стенки ячейки, могут испускать дислокации как в стенку, так и во внутренность ячейки в зависимости от того, в каком направлении движутся дислокации, активизирующие эти источники. Аналогично в соотношении (3.8) при описании увеличения плотности дислокаций в стенках используется скорость сдвига для дислокаций во внутренности.

Второе слагаемое в правой части (3.2) характеризует уменьшение плотности дислокаций во внутренности ячейки за счет того, что некоторая доля дислокаций покидает внутренности ячейки и переходит в стенки [93]:

$$(\dot{\rho}_c)_w^- = -\beta^* \frac{6\dot{\gamma}_c}{bl(1-f)^{1/3}}, \quad (3.4)$$

где β^* – константа, характеризующая долю дислокаций, покидающих внутренности ячейки, $\dot{\gamma}_c$ – скорость сдвига за счет скольжения дислокаций во внутренностях ячейки, определяемая уравнением Орована $\dot{\gamma}_c = \rho_c b v_c$, v_c – средняя скорость скольжения дислокаций во внутренностях ячейки [93], f – объемная доля стенок ячейки.

Наконец, третье слагаемое в правой части (3.2) характеризует уменьшение плотности дислокаций во внутренности ячейки за счет аннигиляции, реализации которой способствует переползание дислокаций [93]:

$$(\dot{\rho}_c)_{cs}^- = -k_0 \left(\frac{\dot{\gamma}_c}{\dot{\gamma}_0} \right)^{-1/n} \dot{\gamma}_c \rho_c, \quad (3.5)$$

где k_0 – константа, $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига при достижении касательным напряжением критического напряжения, n – параметр, характеризующий скоростную чувствительность процесса аннигиляции.

Соотношение для описания эволюции плотности дислокаций в стенке ρ_w принимается в следующем виде [93]:

$$\dot{\rho}_w = (\dot{\rho}_w)_{dep}^+ + (\dot{\rho}_w)_{FR}^+ + (\dot{\rho}_w)_{cs}^-. \quad (3.6)$$

Первое слагаемое в правой части (3.6) характеризует увеличение плотности дислокаций в стенках за счет дислокаций, которые покинули внутренность ячейки [93]:

$$(\dot{\rho}_w)_{dep}^+ = \frac{6\beta^* \dot{\gamma}_c (1-f)^{2/3}}{b l f}. \quad (3.7)$$

Второе слагаемое в правой части (3.6) характеризует увеличение плотности дислокаций в стенках за счет активации источников Франка-Рида в области вблизи стенки и испусканием ими дислокаций внутрь стенки [93]:

$$(\dot{\rho}_w)_{FR}^+ = \frac{\sqrt{3}\beta^* \dot{\gamma}_c (1-f) \sqrt{\rho_w}}{f b}. \quad (3.8)$$

И наконец, третье слагаемое в правой части (3.6) аналогично третьему слагаемому в (3.2) и характеризует уменьшение плотности дислокаций в стенках за счет аннигиляции [93]:

$$(\dot{\rho}_w)_{cs}^- = -k_0 \left(\frac{\dot{\gamma}_w}{\dot{\gamma}_0} \right)^{-1/n} \dot{\gamma}_w \rho_w. \quad (3.9)$$

Проинтегрировав соотношения (3.2), (3.6), можно найти полную плотность дислокаций ρ для ячейки как взвешенную сумму плотностей дислокаций в стенке ρ_w и во внутренности ρ_c [93]:

$$\rho = f \rho_w + (1-f) \rho_c. \quad (3.10)$$

Важным элементом модели является соотношение для эволюции объемной доли стенок f , которая вводится на основе геометрии ячейки [93]. В работе [93] отмечается, что данное соотношение выводится согласно экспериментальным наблюдениям и может быть задано следующей эмпирической функцией [37]:

$$f = f_\infty + (f_0 - f_\infty) e^{-\gamma_r / \tilde{\gamma}_r}, \quad (3.11)$$

где γ_r – скалярная оценка накопленного сдвига по всем СС, f_0 – начальное значение объемной доли стенок, f_∞ характеризует насыщение при больших деформациях, $\tilde{\gamma}_r$ описывает скорость уменьшения объемной доли стенок.

Зная полную плотность дислокаций (3.10), можно определить средний размер ячейки по следующей формуле [93]:

$$l = \frac{K_r}{\sqrt{\rho}}, \quad (3.12)$$

где K_r – параметр пропорциональности.

Зависимость (3.12) была экспериментально подтверждена в работах различных исследователей для разных материалов – для чистого железа [97], меди, сплавов железо-углерод, железо-кремний [199], железо-никель [200], чистого никеля [194].

Соотношения, приведенные выше, связывают скорость изменения размера ячейки l со скоростями сдвигов $\dot{\gamma}_c$ (во внутренности), $\dot{\gamma}_w$ (в стенке) и интегральной оценкой сдвигов $\dot{\gamma}_r$.

Так же, как в работе [93], принимается, что дислокационные ячейки в кристаллите идентичны и механический отклик может быть охарактеризован единственным значением скорости сдвига $\dot{\gamma}_r$. Эта скорость сдвига принимается одинаковой и для стенок, и для внутренностей (согласно гипотезе Фойгта):

$$\dot{\gamma}_w = \dot{\gamma}_c = \dot{\gamma}_r. \quad (3.13)$$

Величина $\dot{\gamma}_r$ определяется соотношением [93]:

$$\dot{\gamma}_r = \left(\sum_{\alpha=1}^K (\dot{\gamma}^{(\alpha)})^{(m_r+1)/m_r} \right)^{m_r/(m_r+1)}, \quad (3.14)$$

где m_r – константа. Вывод соотношения (3.14) приведен в работе [93] и основан на представлении скорости сдвига в виде степенного вязкоупругого соотношения, определении мощности во всем кристаллите суммой мощностей по каждой СС и предположении об изотропном упрочнении.

Скорости сдвигов $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ по СС с номером α для каждого зерна определяются в базовой двухуровневой статистической КМ (2.8)₅.

2. Модификации некоторых соотношений модели ЕТМВ, ориентированные на более точное описание фрагментации

Для более точного физического описания происходящих при фрагментации зерен процессов в диссертации предлагается использовать известные модификации некоторых базовых соотношений модели.

В работе [201] предлагается изменить уравнения (3.5), (3.9), описывающие процесс аннигиляции дислокаций, на уравнения, учитывающие величину энергии дефекта упаковки и температуру. Известно, что аннигиляция является термоактивируемым процессом [202], а также зависит от внутренних характеристик материала, таких как степень диссоциации дислокаций и скорость самодиффузии [22,203], которые и определяются величиной ЭДУ [204]. В работе [205] показано, что при уменьшении величины ЭДУ снижается и скорость аннигиляции дислокаций в металлах.

В модифицированных соотношениях при описании процесса аннигиляции ключевую роль играют переползание винтовых дислокаций (в зарубежной литературе принят термин «cross-slip») для плотности дислокаций во внутренностях и переползание дислокационных диполей (в зарубежной литературе принят термин «climb») для плотности дислокаций в стенках. Заметим, что в базовой КМ ФТП не учитывается влияние винтовых дислокаций на отклик материала, так как плотность винтовых дислокаций мала по сравнению с плотностью краевых дислокаций и принимается, что для эффективного описания отклика материала достаточно учета только краевых дислокаций.

Однако для более точного физического описания протекающих дислокационных процессов в ячейках в рамках модели ЕТМВ их необходимо учитывать. Для этого в диссертационной работе предлагаются соответствующие модификации оригинальных соотношений ЕТМВ. Отметим, что влияние винтовых дислокаций на отклик закладывается только в модификациях модели ЕТМВ, соотношения для скорости неупругих деформаций в (2.8)₅ остаются прежними. Для описания переползания винтовых дислокаций используется

модель Фриделя – Эскайга [206,207], а для переползания дислокационных диполей – описание диффузионных процессов через скорость движения ступенек дислокаций [21,22]. Тогда соотношения для описания процесса аннигиляции в стенках и внутренностях ячеек выглядят следующим образом [201]:

$$(\dot{\rho}_w)_{cs}^- = -B \exp\left(\frac{-U}{RT}\right) \left[\exp\left(\frac{\Omega_r \tau^*}{k_B T}\right) - 1 \right] \rho_w^2, \quad (3.15)$$

$$(\dot{\rho}_c)_{cs}^- = -\frac{Gb^4 v_D}{8\pi \Gamma V} \exp\left(-A \ln\left(\frac{Gb^4 v_D}{16\pi \Gamma V \dot{\gamma}_c}\right) + \frac{\tau_c V}{Gb^3}\right) \rho_c, \quad (3.16)$$

где $B = \frac{8\alpha b^2 v_D n_c}{\delta} \left(\frac{24\pi(1-\nu)}{(2+\nu)}\right)^2 \left(\frac{\Gamma}{Gb}\right)^2$, α – константа материала, v_D – частота

Дебая, n_c – количество ближайших соседних узлов для диффузии вакансий (для ГЦК n_c равно примерно 11 [22]), δ – константа, ν – коэффициент Пуассона, Γ – энергия дефекта упаковки, U – энергия активации самодиффузии, T – температура, R – универсальная газовая постоянная, Ω_r – атомный объем, τ^* – напряжение, действующее на головную дислокацию в скоплении дислокаций при ИПД, может быть оценено как [208] $2l\sqrt{\rho_w}\tau_w$ или согласно соотношению (3.12) аппроксимировано как $2K_r\tau_w$, τ_w – критические напряжения сдвига в стенках ячейки, определяемые по закону Тейлора [138] $\tau_w = \alpha Gb\sqrt{\rho_w}$, k_B – постоянная Больцмана, V – объем активации для переползания, A – константа, τ_c – критические напряжения сдвига во внутренностях ячейки, определяемые соотношением [138] $\tau_c = \alpha Gb\sqrt{\rho_c}$. Обратим внимание на то, что в этих соотношениях явно учитывается ЭДУ [201]. Действительно, одно из направлений развития многоуровневых моделей ФТП – явный учет в уравнениях глубинных параметров материала, таких как ЭДУ [64].

Кроме того, вслед за [209,210] будем использовать вместо постоянной K_r в (3.12) переменную, которая уменьшается с увеличением накопленного сдвига (аналогично соотношению для объемной доли стенок (3.11)):

$$K_r = K_\infty + (K_0 - K_\infty)e^{-\gamma_r/k_r}, \quad (3.17)$$

где K_∞ характеризует насыщение K_r при больших деформациях, K_0 – начальное значение K_r , k_r – «скорость» изменения K_r . Соотношение (3.17) строится на основе экспериментальных данных, приведенных в [209]. Значения констант K_∞ , K_0 , k_r были взяты согласно работе [209], но изменены для лучшего соответствия данным экспериментов.

Таким образом, используются следующие модификации соотношений модели ЕТМВ: (3.15), (3.16) – уравнения для описания процесса аннигиляции в стенках и внутренностях ячеек [201], (3.17) – уравнение для константы K_r из (3.12) [210]. Введенные модификации представляются хорошей основой для дальнейшего углубленного описания процесса развитой фрагментации. В то же время отметим, что в ряде работ и оригинальная модель ЕТМВ применяется для приближенного описания измельчения зеренной структуры при значительных неупругих деформациях [13,93,211].

Как видно из вышеприведенных соотношений, реализуется полное сопряжение КМ ФТП и модели ЕТМВ: вычисляемые в модели ЕТМВ плотности дислокаций и размеры ячейки согласно (3.1) учитываются в соотношениях для определения упрочнения в КМ ФТП; в свою очередь, скорости сдвигов по СС, определяемые в КМ ФТП, согласно приведенным выше соотношениям определяют скорости изменения плотностей дислокаций в модели ЕТМВ.

Совместная модель сформулирована в скоростях: в КМ ФТП определяются скорости сдвигов по СС $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ и с использованием (3.13), (3.14) вычисляются величины $\dot{\gamma}_r$, $\dot{\gamma}_w$, $\dot{\gamma}_c$; в модели ЕТМВ по формулам (3.2), (3.6) вычисляются скорости изменения плотностей дислокаций во внутренностях ρ_c и стенках ρ_w ячеек; по текущим значениям указанных ВП вычисляются значения полной

плотности дислокаций (3.10), средний размер ячейки (3.12), текущие значения критических напряжений (3.1).

3.2. Результаты совместного использования конститутивной модели и модифицированной модели ЕТМВ для описания эволюции среднего размера ячейки при равноканальном угловом прессовании

Согласно описанным выше соотношениям модифицированной модели ЕТМВ, автором разработан программный код [94], который предназначен для расчета среднего размера ячеек и плотности дислокаций и может применяться для приближенного описания измельчения зерен в рамках программных реализаций различных моделей, описывающих напряженно-деформированное состояние материала при деформировании. В данном случае в диссертации реализовано совместное применение КМ и ЕТМВ с модифицированными соотношениями для приближенного описания измельчения зерен в процессе равноканального углового прессования при комнатной температуре. В экспериментальных работах [212,213] отмечается, что в данном случае (при комнатной температуре) при реализации РКУП рекристаллизацией можно пренебречь. Поэтому процессы рекристаллизации не учитываются в используемой модели, что согласуется с работами других исследователей [13,91,92,201,209,211].

В ходе равноканального углового прессования происходит многократное продавливание заготовки через матрицу в виде двух пересекающихся каналов с внутренним углом Φ , внешним углом Ψ и одинаковой площадью поперечного сечения, вследствие чего в образце происходит простой сдвиг в области соединения каналов матрицы [4]. При этом форма образца существенно не меняется, что позволяет проводить любое количество проходов. Рассматривается маршрут В_с – с поворотом образца на 90° по часовой стрелке при каждом проходе. Для имитации РКУП задавалось кинематическое нагружение с изломом траектории деформации между проходами путем задания

транспонированного градиента скорости $\mathbf{L}(t)$ согласно алгоритму, предложенному в [212]. Для соответствия реальному процессу РКУП в КМ задавалась разгрузка между проходами, для моделирования которой использовался итерационный подход с заданием градиента скорости пропорциональным тензору напряжений с отрицательным коэффициентом, меньшим 1 (в настоящей главе использовалось значение $10^{-5} \text{ (МПа} \cdot \text{с)}^{-1}$). Можно отметить, что одним из преимуществ многоуровневых моделей является их универсальность – применимость для анализа процессов и простого, и сложного нагружения с одним и тем же набором параметров [67,154].

В таблице 3.1 содержатся числовые значения параметров, используемые в численных расчетах и полученные в ходе проведения процедуры идентификации.

Таблица 3.1. Параметры КМ и модифицированной ЕТМВ для меди

Π_{1111}	Π_{1122}	Π_{1212}	$\dot{\gamma}_0^{(k)}$	m	$\tau_{c0}^{(k)}$	α_{MHP}	α_{BH}	G	b	q_{lat}
168.4 ГПа [214]	121.4 ГПа [214]	75.4 ГПа [214]	10^{-3} с^{-1}	50	10 МПа	0.02	0.0132	48 ГПа [215]	2.56 Å [93]	2.0
α^*	β^*	f_0	f_∞	$\tilde{\gamma}_r$	v_D	α	m _r	n_c	δ	v
0.065 [93]	0.012 [93]	0.25 [93]	0.06 [93]	3.2 [93]	10^{13} с^{-1} [215]	0.25 [93]	250	11 [215]	5 [215]	0.31 [215]
Γ	U	T	k_B	Ω_r	R	V	A	K_∞	K_0	k_r
45 мДж/м ² [215]	203 кДж/ моль [215]	300 К	$1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К	b^3 [215]	8.31 Дж/ (моль·К)	$300b^3$ [215]	0.885	9.5	30	4.0

На рисунке 3.2 показана зависимость интенсивности напряжений и доли кристаллитов с определенным числом близких к активности систем скольжения

от интенсивности накопленных деформаций при двух проходах РКУП типа В_С с углом $\Phi = 90^\circ$, $\Psi = 0^\circ$ при комнатной температуре. Близость к активности систем скольжения определялась согласно алгоритму, предложенному в [154]. Для этого вычислялся модуль разности между касательными напряжениями и их критическими значениями. Если полученное значение было меньше заданного допуска (в диссертации использовалось значение 5 МПа), то система считалась близкой к активности.

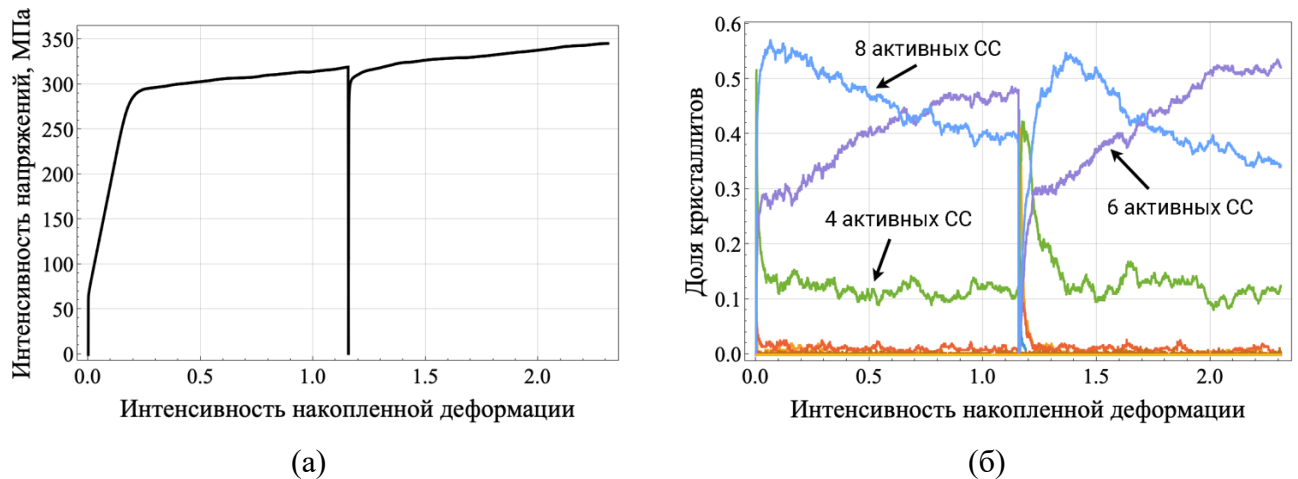


Рисунок 3.2. Зависимости (а) интенсивности напряжений, (б) доли кристаллитов с определенным числом близких к активности систем скольжения от интенсивности накопленных деформаций при двух проходах РКУП типа В_С

Отметим, что алгоритм по поиску близких к активности систем скольжения полезен для проведения анализа движения изображающей точки в пространстве напряжений по поверхности текучести, особенно для нагружений с изломом траектории деформации. Подобный анализ позволяет достаточно просто и понятно объяснить изменения интенсивности напряжений на кривой деформирования при нагружениях с изменяющейся траекторией деформации. По рисунку 3.2б можно заключить, что сразу после точки излома траектории деформации доля кристаллитов с четырьмя близкими к активности системами скольжения выше остальных. Это, в свою очередь, отражается на кривой деформирования понижением интенсивности напряжений после точки излома. Заметим, что сопоставление результатов моделирования и экспериментальных

данных по кривым деформирования при РКУП на рисунке 3.2а не представляется возможным, так как экспериментально невозможно измерить напряжения течения в ходе РКУП. Поэтому аналогично другим работам [13,92,128,209,215] по моделированию РКУП в диссертации проводится сопоставление результатов моделирования и экспериментальных данных по текстурам, пределам текучести на растяжение и характеристикам внутренней структуры (плотностям дислокаций и среднему размеру ячеек) после различного числа проходов РКУП.

Для проверки влияния РКУП на механические свойства образцов в таблице 3.2 приведены пределы текучести $\sigma_{0.2}$ при квазиодноосном растяжении вдоль продольной оси Ox_1 $L(t) = \dot{\epsilon} p_1 p_1 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} p_2 p_2 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} p_3 p_3$ со скоростью деформации $\dot{\epsilon} = 0.0017 \text{ с}^{-1}$ образцов из меди, подвергнутых предварительному деформированию РКУП при различном числе проходов (здесь растяжение после 0 проходов соответствует растяжению образца в состоянии поставки) при указанных выше условиях, для результатов моделирования и экспериментальных данных [216].

Таблица 3.2. Пределы текучести при одноосном растяжении вдоль оси Ox_1 после различного числа проходов РКУП: расчетные и экспериментальные данные [216]

Номер прохода	Предел текучести $\sigma_{0.2}$ (модель), МПа	Предел текучести $\sigma_{0.2}$ (эксперимент), МПа
0	75.4	68±6
1	345.6	342±5
2	380.0	407±22
4	436.4	415±4

Видно, что результаты моделирования находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

На рисунке 3.3 приведены текстуры (проецирование с оси Ox_3 , где $Ox_1x_2x_3$ – система координат, связанная с образцом), получаемые при моделировании

разного числа проходов РКУП. В начальный момент времени задавалось равномерное распределение ориентаций.

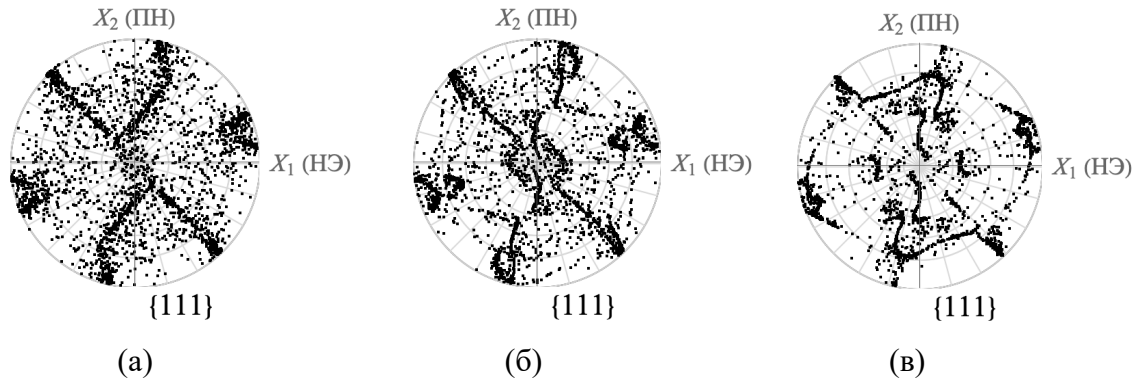


Рисунок 3.3. Текстуры после различного числа проходов РКУП по маршруту В_С: (а) после первого прохода, (б) после второго прохода, (в) после четвертого прохода

Результаты моделирования на рисунке 3.3 удовлетворительно соответствуют данным эксперимента [212]. Заметим, что при деформировании на втором и последующих проходах текстура, сформировавшаяся на первом проходе, сохраняет свою форму, но при этом происходит ее «заострение».

На рисунке 3.4 приведены зависимости плотности дислокаций во внутренностях ячеек и среднего размера ячеек от интенсивности накопленных деформаций при четырех проходах РКУП, получаемые в модельных расчетах, и экспериментальные данные [209]. Средний размер ячеек вычисляется осреднением по всем зернам поликристалла.

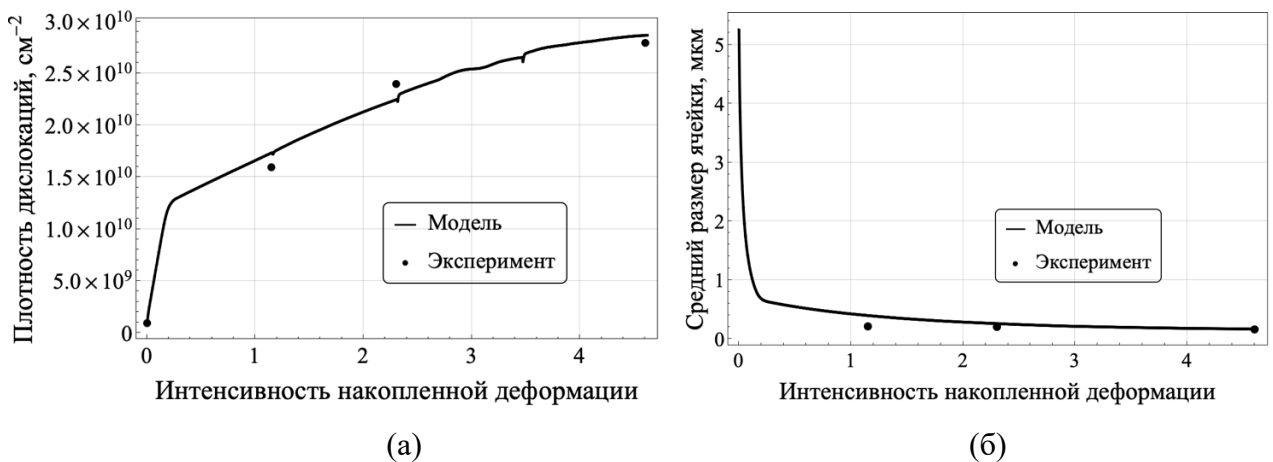


Рисунок 3.4. Зависимости (а) плотности дислокаций во внутренностях ячеек, (б) среднего размера ячеек от интенсивности накопленных деформаций при четырех проходах РКУП, получаемые в модельных расчетах, и экспериментальные данные [209]

Приведенные на рисунке 3.4 результаты моделирования находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными [209], что свидетельствует о способности разрабатываемой модели к описанию фрагментации в ходе ИПД процессов. Результаты для плотности дислокаций в стенках ячейки не приводятся, так как авторы [209] отмечают, что экспериментально измерялась только плотность дислокаций во внутренностях ячеек; плотность дислокаций в стенках высчитывалась согласно соотношениям предложенной одномерной градиентной макрофеноменологической модели с интегрированной моделью ЕТМВ.

При совместном использовании КМ ФТП и ЕТМВ анализировалось распределение среднего размера ячеек по кристаллитам. На рисунке 3.5 приведены гистограммы для долей кристаллитов, имеющих средний размер ячейки в определенном диапазоне, после различного числа проходов РКУП. В начальный момент времени все кристаллиты имеют одинаковый средний размер ячейки.

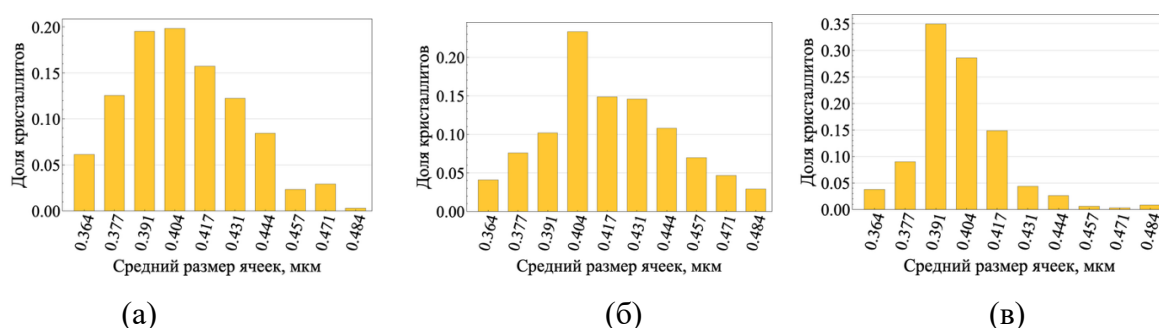


Рисунок 3.5. Гистограммы распределения среднего размера ячеек по кристаллитам на конец (а) первого прохода, (б) второго прохода, (в) четвертого прохода

Результаты на рисунке 3.5 соответствуют логнормальному распределению и качественно согласуются с экспериментальными данными [13]. Различия в значениях среднего размера ячеек для разных кристаллитов объясняются различиями в реализации внутризеренного дислокационного скольжения в них, так как средний размер ячейки зависит от интегральной оценки накопленного пластического сдвига. Заметим, что дисперсия распределения уменьшается с

увеличением числа проходов, что соответствует отмечаемому в литературе [14,215] переходу структуры поликристалла от крупнозернистой к мелкозернистой с равноосными зернами.

3.3. Применение модели для описания измельчения зерен при холодной гибке листа стали 08X18H10

Для эффективного совершенствования технологических процессов, например, определения оптимального числа проходов заготовки для достижения заданной геометрии изделия, требуемых эксплуатационных характеристик или повышения точности и производительности процесса целесообразным является применение методов многоуровневого цифрового проектирования изделий. В данном разделе приведены результаты по решению тестовой задачи моделирования холодной гибки листа стали 08X18H10 (наиболее близкий зарубежный аналог AISI 304) с использованием коммерческого МКЭ-пакета и разработанной двухуровневой статистической конститутивной модели с интегрированной моделью ETMB для описания измельчения зерен. Отметим, что в соответствии с работами [25,41,217] для стали AISI 304 сценарий фрагментации при низких и умеренных температурах аналогичен процессу для материалов со средней и высокой ЭДУ. В связи с этим в текущем разделе приводятся результаты приближенного моделирования процесса фрагментации без учета влияния двойникования и фазовых превращений на него, отмечаемых в других литературных источниках (например, в [218]). В перспективе для углубленного анализа процесса возможно учесть указанные механизмы в рамках КМ.

Рассматривается процесс гибки при комнатной температуре (24° C), в результате которого исходный лист приобретает форму, близкую к цилиндрической. Заметим, что разница в температуре между различными частями заготовки мала и не превышает 4° C [219].

В конечно-элементной модели установка для холодной гибки включает в себя лист металла и обрабатывающие валы (рисунок 3.6). Производится разбиение листа заготовки на тетраэдральные конечные элементы с характерным размером 0.04 м, поверхность роликов разбивается на квадратные конечные элементы с размером 0.038 м.

В ходе моделирования рассматриваемого технологического процесса необходимо решать контактную задачу, так как поверхность роликов напрямую взаимодействует с поверхностью листа металла. На первом этапе верхний ролик опускается вниз, создавая сжимающие поля деформаций и напряжений, превышающие предел текучести материала, вследствие чего происходит неупругое деформирование заготовки. Глубина, на которую опускается ролик, в дальнейшем определяет радиус кривизны получаемого изделия [220]. Затем ролики начинают вращаться сначала в одну, а потом в обратную стороны, тем самым прокатывая лист металла по траектории, определяемой прогибом на первом этапе. Финальная форма детали зависит как от величины прогиба на первом этапе, так и от расстояния между нижними роликами. На рисунке 3.6 приведены поля напряжений в конце каждого этапа описываемого процесса.

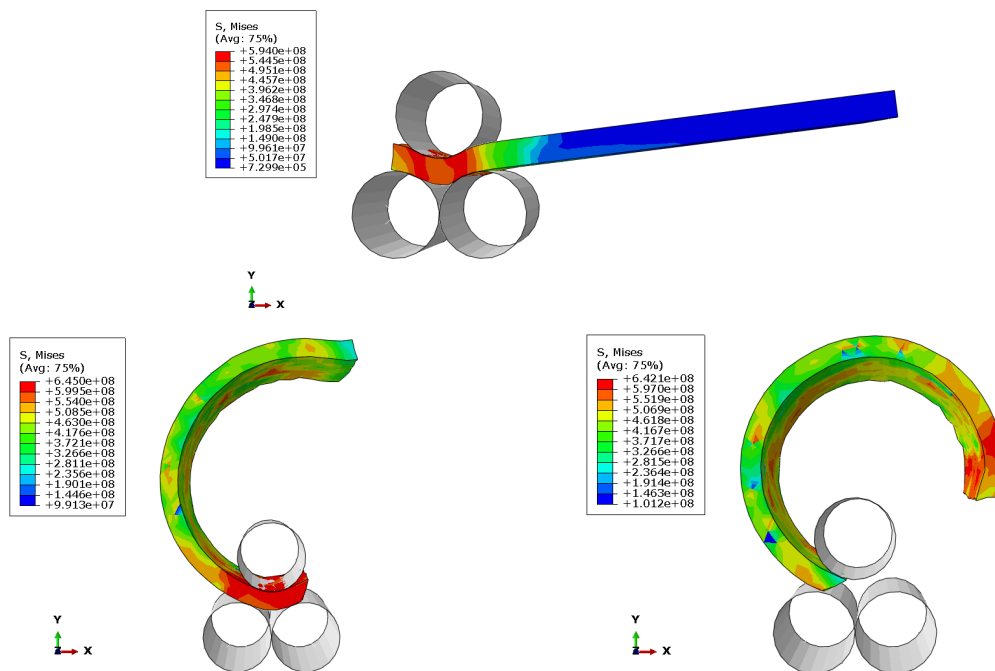


Рисунок 3.6. Поля интенсивности напряжений в сечении заготовки в конце каждого этапа холодной гибки

При варьировании параметров установки, таких как радиус роликов, расстояние между ними, глубина погружения верхнего вала, коэффициент трения между поверхностями роликов и заготовкой, могут быть получены изделия с требуемой геометрией. В таблице 3.3 приведены параметры материала, используемые в диссертации, при применении в МКЭ-расчете модели пластического течения.

Таблица 3.3. Параметры стали 08X18H10 при комнатной температуре

Параметр	Значение	Источник
Плотность	7900 кг/м ³	[221]
Модуль Юнга	195 ГПа	[222]
Коэффициент Пуассона	0.29	[221]
Диаграмма нагружения	–	[222]
Коэффициент трения	0.3	–

Разработанная двухуровневая статистическая КМ с модифицированной моделью ЕТМВ применена для уточненного исследования изменения НДС для пяти выбранных материальных точек (рисунок 3.7) из объема исследуемой заготовки в виде изогнутой пластины, полученной в результате двух последовательных проходов холодной гибки.

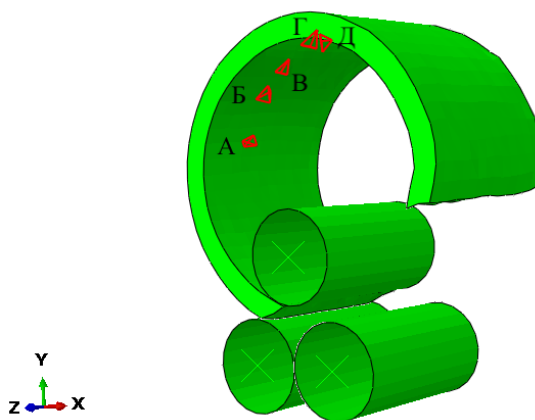


Рисунок 3.7. Материальные точки, выбранные для исследования с помощью двухуровневой КМ, учитывающей измельчение зерен

Разработанная двухуровневая КМ основана на расширенной гипотезе Фойгта, то есть принимает в качестве воздействия транспонированный градиент скорости перемещений $\hat{\nabla}\mathbf{v}$. Воздействия на рассматриваемые точки определены в результате решения краевой задачи с применением макрофеноменологической модели (данные о полученном решении приведены выше на рисунке 3.6). Для краткости приведем здесь только зависимости компонент градиента скорости от времени $\left[\hat{\nabla}\mathbf{v}\right]_{ij}(t)$ для материальной точки Γ (при этом сводные данные о результатах расчетов для всех точек $A-D$ приведены в таблице 3.4). Определенные в ЛСК зависимости $\left[\hat{\nabla}\mathbf{v}\right]_{ij}(t)$ для материальной точки Γ приведены на рисунке 3.8. пилообразное изменение компонент на рисунке связано с знакопеременным нагружением в результате прямого и реверсивного движений заготовки.

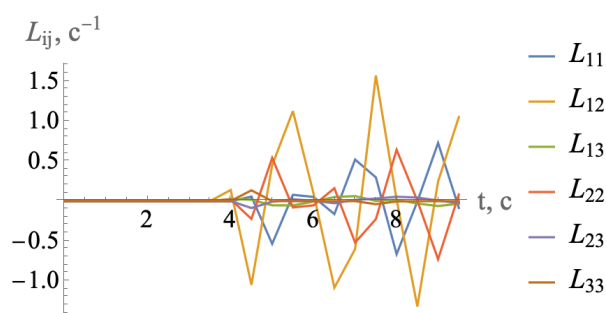


Рисунок 3.8. Зависимости компонент градиента скорости от времени для материальной точки Γ

Двухуровневая КМ с модифицированной моделью ЕТМВ для описания измельчения зерен применена для выработки рекомендаций по улучшению физико-механических свойств (в частности, повышению предела текучести) изогнутой пластины после двух проходов холодной гибки. Для этого были проведены расчеты для двух режимов анализируемого процесса и выбран режим с такими параметрами процесса, при которых получается более высокий предел текучести. Первый режим являлся базовым и реализовывался при параметрах МКЭ-модели, указанных в таблице 3.3, и скорости движения верхнего ролика

вдоль оси ОУ 0.014 м/с. Второй режим отличался от первого скоростью движения верхнего ролика вдоль оси ОУ (0.012 м/с), в следствие чего отличалась и конечная степень придавливания, и коэффициентом трения (0.4). При этом конечные формы изделий, получаемые при двух указанных режимах, являются близкими.

На рисунке 3.9 приведены зависимости интенсивности напряжений от времени для материальной точки Γ при первом и втором режимах процесса гибки.

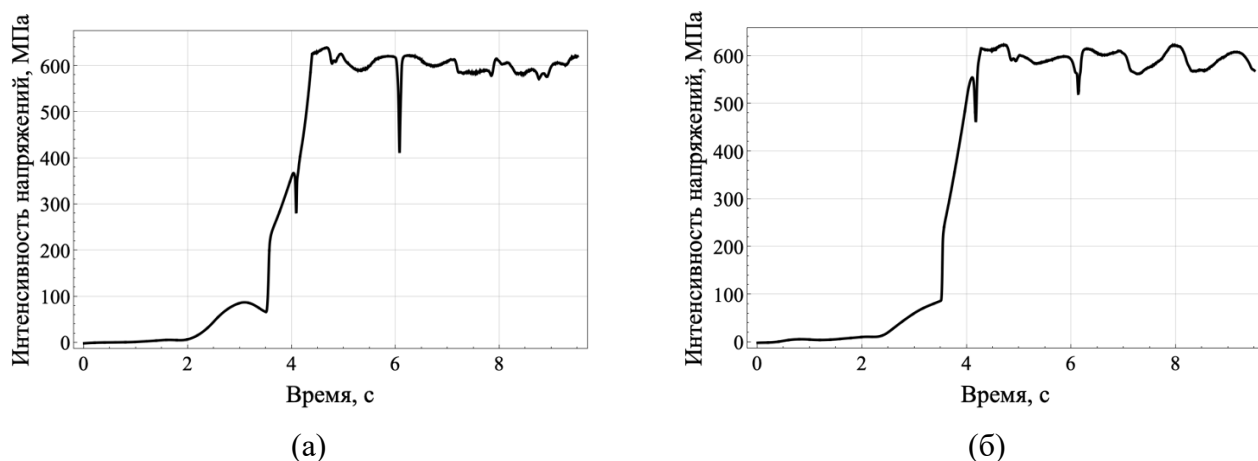


Рисунок 3.9. Зависимости интенсивности напряжений от времени для материальной точки Γ при (а) первом режиме, (б) втором режиме процесса холодной гибки

На рисунке 3.10 приведены зависимости среднего размера ячеек от времени для материальной точки Γ при первом и втором режимах процесса гибки.

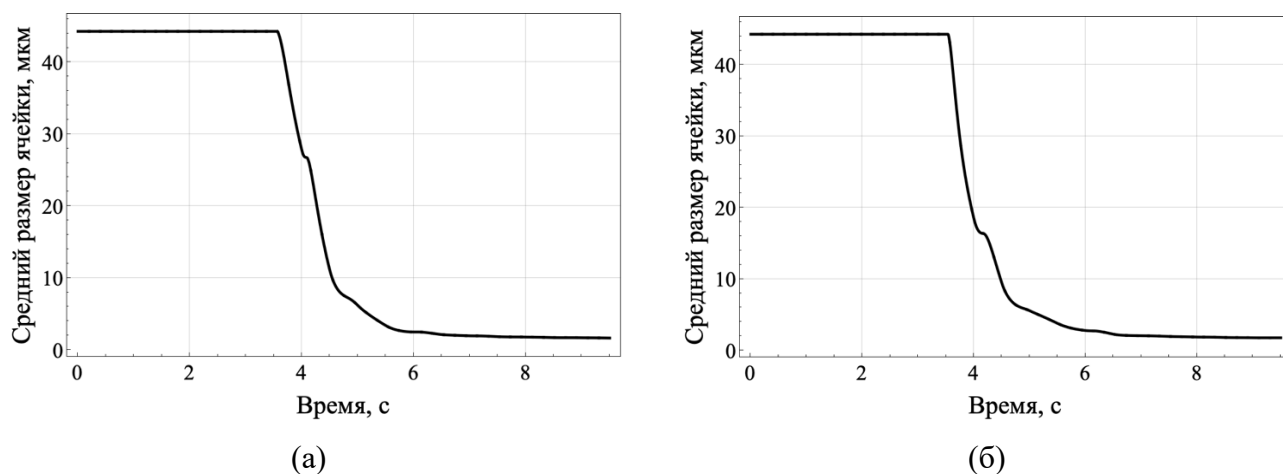


Рисунок 3.10. Зависимости среднего размера ячеек от времени для материальной точки Γ при (а) первом режиме, (б) втором режиме процесса холодной гибки

По результатам на рисунках 3.9 и 3.10 видно, что на начальном этапе процесс деформирования практически не реализуется, так как рассматриваемая точка ещё не успела достигнуть прижимного ролика. При продолжении деформирования активно идёт процесс измельчения, что качественно согласуется с результатами других исследователей [223,224].

В таблице 3.4 приведены результаты по получаемым конечным средним размерам ячеек при двух режимах процесса холодной гибки для материальных точек *А–Д*.

Таблица 3.4. Конечные средние размеры ячеек для материальных точек *А–Д* при двух режимах процесса гибки

Точка Режим	<i>А</i>	<i>Б</i>	<i>В</i>	<i>Г</i>	<i>Д</i>
1	1.88 мкм	1.8 мкм	1.75 мкм	1.74 мкм	1.83 мкм
2	2.0 мкм	1.91 мкм	1.93 мкм	1.86 мкм	1.96 мкм

Для функционирования большинства изделий наиболее благоприятной является мелкозернистая структура, так как по закону Холла-Петча при более мелком размере зерна наблюдается более высокий предел текучести [24]. Для получения необходимой структуры целесообразно выбрать режим гибки, при котором достигается наименьший размер зерна за меньшее время деформирования. В данном случае, согласно результатам таблицы 3.4, таким режимом обработки является первый режим холодной гибки листа стали (при нем получен меньший размер зерна для всех рассматриваемых точек).

Отметим, что для более физически обоснованного описания процесса фрагментации предложенная двухуровневая конститутивная модель с модифицированной подмоделью ЕТМВ требует усовершенствования – особенно это актуально для описания процессов ОМД, поскольку в модели ЕТМВ описывается переход ячеек в новые зерна без явного учета трансформации в блоки и субзерна. Заметим, что в оригинальной модели ЕТМВ [37,93] и её

модификациях [146,215] критерием, характеризующим образование новой мелкозернистой структуры, является гипотеза о том, что при очень больших деформациях (характерных для ИПД процессов) средний размер ячейки сопоставим со средним размером зерна, что является существенным недостатком модели. Кроме того, в модели ЕТМВ не учитывается влияние границ блоков и границ зерен на реализацию процесса измельчения. Эти важные элементы структуры материала и их влияние на процесс измельчения учитываются эффективным образом в указанном феноменологическом соотношении для среднего размера ячеек, что не согласуется с детальным описанием перестроения дефектной структуры для ячеек. В то же время в соответствии с методологией математического моделирования (раздел 1.3) построение КМ–ЕТМВ являлось необходимым этапом для создания целевой математической модели. В главе 4 приведены результаты по созданию новой КМ для описания фрагментации зерен с учетом рассмотрения плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций на системах скольжения, размера фрагментов и зерен, разворотов фрагментов.

4. Новая многоуровневая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики с учетом ключевых механизмов фрагментации зерен

В диссертационной работе для описания уменьшения размеров зерен в процессе фрагментации разработана и численно реализована целевая новая дислокационная модель, результаты с применением которой опубликованы в [225]. Структура ДМ сформулирована на основе детального анализа физических представлений о процессе измельчения [31,32,36,40], в частности, приведенных в описанной в виде концепции прямой модели в разделе 1.3, и разработанной модификации [146] модели ЕТМВ [37,93] для приближенного описания измельчения, соотношения которой приведены в разделе 3.1. Дислокационная модель разработана для комплексного и адекватного учета эволюции структуры материала и ключевых механизмов деформирования в ходе процесса фрагментации и при этом обладает вычислительной ресурсоемкостью, достаточной для дальнейшего эффективного моделирования реальных технологических процессов (это подтверждается результатами расчетов, приведенными в разделе 4.2). Отметим, что в некоторых моделях учитывается генерация новых зерен [91,92], что существенно повышает ресурсоемкость модели и приводит к неэффективности (иногда – и невозможности) численного моделирования реальных технологических процессов.

Для учета влияния характеристик внутренней структуры на НДС кристаллитов в КМ в качестве эволюционного уравнения для критических напряжений сдвига (2.8)₇ используется соотношение с учетом влияния на упрочнение материала различных механизмов:

$$\begin{aligned}\tau_c^{(k)} &= \tau_{c0}^{(k)} + \tau_{cHPf}^{(k)} + \tau_{cHPg}^{(k)} + \tau_{cBH}^{(k)}, \\ \tau_{cHPf}^{(k)} &= k_{HPf} / \sqrt{d_f}, \quad \tau_{cHPg}^{(k)} = k_{HPg} / \sqrt{d_g}, \\ \tau_{cBH}^{(k)} &= \alpha_{BH} G b \sum_{s=1}^K \Omega^{(ks)} \sqrt{\rho_{SSD}^{(s)}},\end{aligned}\tag{4.1}$$

где (4.1)₂ – соотношения Холла–Петча, учитывающие влияние на упрочнение границ фрагментов и зерен соответственно [226–228], k_{HPf} , k_{HPg} – константы, d_f – размер эффективного фрагмента в зерне, d_g – средний размер зерна в ПО, (4.1)₃ – соотношение, аналогичное (3.1)₃, $\rho_{SSD}^{(s)}$ – плотность статистически накопленных дислокаций на системе скольжения s . Заметим, что подобная форма соотношения (4.1) без учета влияния размера фрагментов на упрочнение применяется во многих работах, например, в [87,91,127,196].

Для описания ротации решеток кристаллитов используется модель решеточного поворота, детально описанная в работах [62,66,67]:

$$\omega = \mathbf{I} \times (\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3) : \mathbf{l}_e, \quad (4.2)$$

где $\mathbf{I}$ – единичный тензор, $\mathbf{k}_i$, $i = \overline{1,3}$ – базис ПСК [62].

4.1. Структура модели для описания фрагментации зерен на базе континуальной дислокационной динамики

Объектом исследования в дислокационной модели фрагментации является состоящий из N_g зерен представительный объем материала. Зерна в ПО отделены друг от друга большеугловыми границами зерен [40]. По аналогии с моделью ЕТМВ [37,93] в рамках ДМ каждому зерну приписывается эффективный (средний) фрагмент (рисунок 4.1), описываемый плотностью статистически накопленных дислокаций $\rho_{SSD}^{(i)}$, плотностью геометрически необходимых дислокаций $\rho_{GND}^{(i)}$, размером $d_f^{(i)}$ и углом разориентации $\theta^{(i)}$, $i = \overline{1, N_g}$. Заметим, что указанные параметры эффективного фрагмента соответствуют осредненным параметрам по всем реальным фрагментам в зерне. В рамках всего ПО вводятся величины удельной площади (на единицу объема) границ фрагментов S_f и границ зерен S_g .

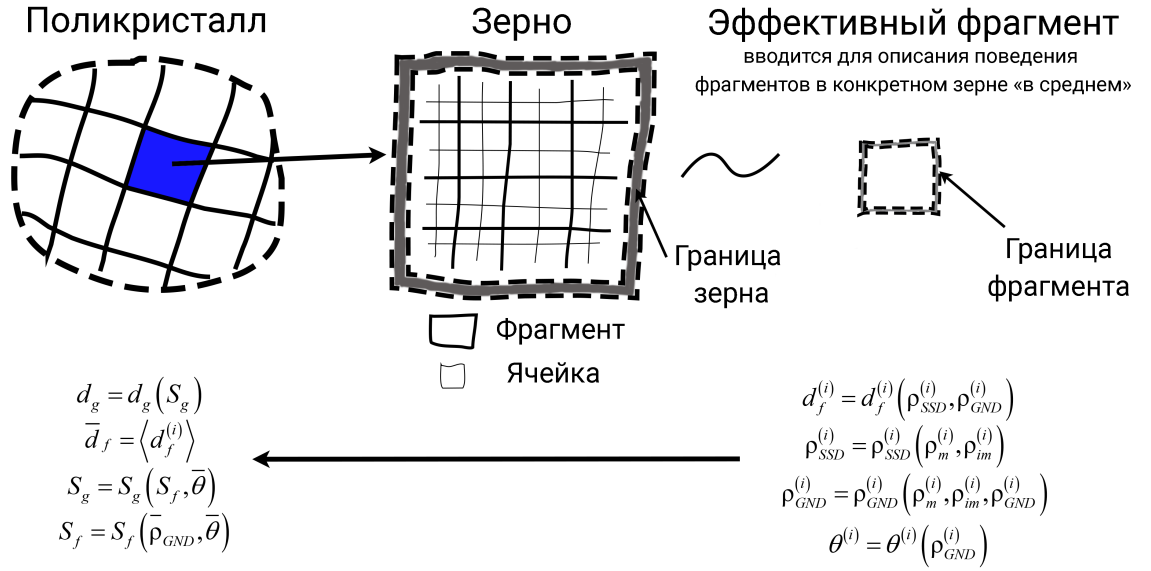


Рисунок 4.1. Схема дислокационной модели фрагментации

В ДМ для описания процесса измельчения на уровне поликристалла вводятся величины среднего размера фрагментов $\bar{d}_f$ и среднего размера зерна d_g . Средний размер фрагментов определяется осреднением размеров эффективных фрагментов $d_f^{(i)}$ для зерен, которые вычисляются на основе плотностей СНД, ГНД и удельной площади границ зерен. Средний размер зерна в поликристалле определяется с помощью величины удельной площади границ зерен, которая вычисляется на основе средних углов разориентации фрагментов $\bar{\theta}$ и удельной площади границ фрагментов S_f . В соотношении для определения последней учитывается генерация новых границ фрагментов на основе средних плотностей ГНД $\bar{\rho}_{GND}$, при этом средний угол разориентации фрагментов в зерне также вычисляется на основе плотности ГНД. При вычислении плотности СНД и ГНД в эффективном фрагменте учитываются ключевые дислокационные процессы, протекающие в зерне.

Введение размеров характерных элементов структуры материала на двух масштабных уровнях позволяет более подробно описать процесс фрагментации зерен на начальных этапах деформирования, что актуально для многих процессов ОМД. В отличие от модели ЕТМВ [37,93], где описывается только

изменение среднего размера ячейки и поэтому средний размер зерна можно определить только при очень больших деформациях в ходе процессов ИПД [32], считая его сопоставимым со средним размером ячейки, в предлагаемой дислокационной модели по отдельности описывается уменьшение размеров фрагментов и их развороты на уровне зерен на основе происходящих в них дислокационных процессов, а также на уровне поликристалла явно учитывается уменьшение среднего размера зерна за счет увеличения удельной площади границ фрагментов при переходе фрагментов в новые зерна. При этом явный переход блоков ячеек в субзерна для сокращения ресурсоемкости в модели не описывается, но о нем косвенно можно судить по величинам углов разориентации фрагментов. В рамках приведенной в главе 2 базовой двухуровневой статистической КМ каждое зерно поликристалла и соответствующий ему эффективный фрагмент в ДМ описывается с помощью уравнений мезоуровня [30]. При реализации ДМ подразумевается, что исходная структура фрагментов в каждом зерне уже сформирована и с использованием описанных ниже уравнений моделируется её эволюция при деформировании.

Рассмотрим далее подробно ключевые соотношения ДМ. На уровне эффективного фрагмента, соответствующего отдельному зерну в поликристалле, последовательно вычисляются плотность дислокаций внутри фрагмента (статистически накопленные дислокации), плотность дислокаций в границе фрагмента (геометрически необходимые дислокации), размер эффективного фрагмента и угол разориентации его с окружением. Заметим, что при описании указанных уравнений для краткости номер эффективного фрагмента опущен. На уровне поликристалла с использованием осреднения указанных выше величин для зерен определяются удельная площадь границ фрагментов, удельная площадь границ зерен, средний размер фрагментов и средний размер зерна в поликристалле.

1. Описание эволюции плотности дислокаций внутри фрагментов

Статистически накопленными дислокациями являются дислокации внутри фрагмента, в частности дислокации, формирующие ячейки [141]. Отметим, что в ДМ для повышения численной эффективности ячейки явно не описываются. В настоящей работе формулируется модель описания эволюции плотности СНД в рамках подхода континуальной дислокационной динамики [91,92,125–127], в котором суммарная плотность статистически накопленных дислокаций делится на плотность подвижных $\rho_m^{(k)}$ и неподвижных дислокаций $\rho_{im}^{(k)}$. Заметим, что в настоящей работе не рассматривается явное разделение дислокаций на краевые и винтовые, предполагая наличие дислокаций обоих типов в общей плотности СНД. В отличие от дискретной дислокационной динамики [129,130], в которой для анализа эффектов при неупругом деформировании материала моделируется коллективное поведение отдельных дислокаций и их взаимодействие, в континуальной дислокационной динамике вводятся плотности дислокаций, описывающие дислокационные процессы интегрально (в среднем) [125].

Под подвижными дислокациями в контексте предлагаемой КМ–ДМ будем понимать такие, которые при приложении касательных напряжений, равных критическим, будут перемещаться. Подвижными дислокациями, в основном, являются дислокации во внутренностях, а неподвижными – дислокации в стенках ячейки, которые образуются из подвижных дислокаций при их взаимодействии друг с другом и состоят из дислокационных диполей, узлов, клубков, скоплений и т.п. Таким образом, плотность СНД в эффективном фрагменте делится на интегральную плотность подвижных дислокаций (фактически дислокаций во внутренностях ячеек) и неподвижных (дислокаций в стенках ячеек):

$$\rho_{SSD}^{(k)} = \rho_m^{(k)} + \rho_{im}^{(k)}, \quad k = \overline{1, K}, \quad (4.3)$$

Эволюционное уравнение для плотности подвижных дислокаций состоит из девяти слагаемых, описывающих основные механизмы взаимодействия

дислокаций (соотношения (4.4), (4.6) для расчета плотности СНД приводятся согласно работам [91,92,125–127,229]):

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_m^{(k)} = & \alpha_1 \rho_m^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - 2\alpha_2 R_c (\rho_m^{(k)})^2 |v^{(k)}| - \\ & - \alpha_3 \rho_m^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} + \alpha_4 \left(|v^{(k)}| / \tau_c^{(k)} \right)^\xi \rho_{im}^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} + \\ & + \alpha_5 \sum_{s=1}^{K_{cs}} P^{(k)(s)} \rho_m^{(s)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - \alpha_6 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{im}^{(k)} |v^{(k)}| - \\ & - \alpha_7 \rho_m^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} + \alpha_8 \left(|v^{(k)}| / \tau_c^{(k)} \right)^\xi \rho_{GND}^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - \\ & - \alpha_9 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{GND}^{(k)} |v^{(k)}|, \quad k = \overline{1, K} \end{aligned} \quad (4.4)$$

где $\alpha_1 - \alpha_9$ – коэффициенты, отвечающие за вклад различных механизмов в скорость изменения плотности подвижных, неподвижных и геометрически необходимых дислокаций [91,92,125–127,229], $d^{(k)}$ – средняя длина свободного пробега дислокаций, определяемая ниже, R_c – критическое расстояние для реализации аннигиляции дислокаций, ξ – константа, K_{cs} – количество плоскостей для переползания (для ГЦК $K_{cs} = 2$), $P^{(k)(s)}$ – матрица вероятности для переползания, полученная методом Монте-Карло (компоненты могут принимать значения: (0) – нет переползания, (+1) – «приход» дислокаций на систему скольжения k , (–1) – «уход» дислокаций с системы скольжения s) [125].

Первые шесть слагаемых в (4.4) записываются на основе работ [91,92,125–127]. Первое слагаемое описывает увеличение плотности подвижных дислокаций за счет генерации их источниками Франка-Рида. Второе слагаемое описывает аннигиляцию двух подвижных дислокаций противоположного знака. Третье слагаемое отражает возможность подвижных дислокаций стать неподвижными вследствие перехода дислокаций из внутренних в стенки ячейки. Четвертое слагаемое описывает возможность неподвижных дислокаций стать подвижными по причине обратного перехода из стенок во внутренности ячейки при достижении критических напряжений. В пятом слагаемом учитывается переползание винтовых дислокаций из одной системы скольжения в другую. Шестое слагаемое отражает аннигиляцию между подвижными и

неподвижными дислокациями. Следующие слагаемые записываются по аналогии с моделью, предложенной в [229]. Седьмое слагаемое описывает переход подвижных дислокаций в ГНД по аналогии с третьим слагаемым. Восьмое слагаемое по аналогии с четвертым слагаемым учитывает возможность перехода из ГНД в подвижные дислокации. Девятое слагаемое необходимо для учета аннигиляции подвижных дислокаций и ГНД и записывается по аналогии с шестым слагаемым.

При определении значений слагаемых в (4.4) используется средняя длина свободного пробега дислокаций по системам скольжения $d^{(k)}$, которая вычисляется как среднее гармоническое:

$$\frac{2}{d^{(k)}} = \frac{1}{d_{\rho}^{(k)}} + \frac{1}{d_g}, \quad k = \overline{1, K}, \quad d_{\rho}^{(k)} = \frac{K_f}{\sqrt{\sum_{s=1}^K \Omega^{(ks)} (\rho_{SSD}^{(s)} + \rho_{GND}^{(s)})}}, \quad (4.5)$$

где $d_{\rho}^{(k)}$ – оценка средней длины свободного пробега на основе плотности дислокаций в зерне, d_g – оценка средней длины свободного пробега на основе среднего размера зерна в ПО, K_f – константа. Формула (4.5) предложена для учета влияния границ зерен на процесс фрагментации. Первое значение в правой части (4.5) характеризует оценку средней длины свободного пробега на основе плотности дислокаций в зернах (оценка снизу), а второе – на основе величины среднего размера зерна (оценка сверху). Здесь под «оценкой снизу» и «оценкой сверху» подразумевается, что величина $d_{\rho}^{(k)}$ должна быть меньше величины d_g согласно физическим соображениям. Таким образом, при малых деформациях первое слагаемое будет вносить бóльший вклад в выражение для $d^{(k)}$, а с ростом деформаций (например, при очень больших деформациях в ходе ИПД) две оценки для средней длины свободного пробега будут сближаться, что свидетельствует об увеличении доли влияния границ зерен. Заметим, что аналогичное соотношение было предложено в работе [230] при описании деформирования материала с изменяющейся траекторией нагружения.

Для плотности неподвижных дислокаций в соответствии с (4.4) эволюционное уравнение выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{im}^{(k)} = & \alpha_3 \rho_m^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - \alpha_4 \left(|\tau^{(k)}| / \tau_c^{(k)} \right)^\xi \rho_{im}^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - \\ & - \alpha_6 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{im}^{(k)} |v^{(k)}| - \alpha_{10} \rho_{im}^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)}, \quad k = \overline{1, K}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

Последнее слагаемое в (4.6) по аналогии с третьим и седьмым слагаемым в (4.4) описывает переход некоторой доли неподвижных дислокаций в ГНД, тем самым учитывая переход стенок ячеек в границы фрагментов [229].

Коэффициенты $\alpha_1 - \alpha_{10}$ могут быть получены либо из вычислительных экспериментов дискретной дислокационной динамики [125], либо в ходе идентификации по экспериментальным данным. Отметим, что соотношения (4.4), (4.6) более детально учитывают происходящие при деформировании дислокационные процессы на системах скольжения в отличие от модели ЕТМВ, где аналогичные процессы учитываются интегрально [37,93]. При этом коэффициенты $\alpha_1 - \alpha_{10}$ должны зависеть от параметров нагружения (температуры и скорости деформации) и внутренних характеристик структуры материала (например, ЭДУ, наличия примесей); соответствующее развитие модели представляется весьма перспективным.

2. Описание эволюции плотностей дислокаций на границах фрагментов

Геометрически необходимые дислокации – дислокации, составляющие геометрически необходимые границы между фрагментами. Скорость изменения плотности геометрически необходимых дислокаций вычисляется аналогично плотности подвижных и неподвижных СНД на основе соотношений (4.4), (4.6) [229]:

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_{GND}^{(k)} = & \alpha_7 \rho_m^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - \alpha_8 \left(|\tau^{(k)}| / \tau_c^{(k)} \right)^\xi \rho_{GND}^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)} - \\ & - \alpha_9 R_c \rho_m^{(k)} \rho_{GND}^{(k)} |v^{(k)}| + \alpha_{10} \rho_{im}^{(k)} |v^{(k)}| / d^{(k)}, \quad k = \overline{1, K}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

Заметим, что для определения плотности ГНД зачастую используют формулу на основе тензора Ная, представляющего собой ротор от скорости

неупругой деформации [91,117,127,231]. Однако при таком способе вычисления плотности ГНД явно не учитываются дислокационные процессы, которые необходимо принимать во внимание при сложном нагружении.

3. Описание эволюции размера эффективного фрагмента

Размер эффективного фрагмента в зерне определяется как среднее значение $d_{\rho}^{(k)}$ по всем системам скольжения:

$$d_f = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K d_{\rho}^{(k)}. \quad (4.8)$$

Далее по найденным размерам эффективных фрагментов аналогично модифицированной модели ЕТМВ [146] вычисляется средний размер фрагментов в поликристалле. Отметим, что при больших деформациях он будет сопоставим со средним размером зерна.

4. Описание разориентации эффективного фрагмента

В ДМ моделирование разориентации фрагментов в зерне описывается с использованием доли ГНД, составляющих границы фрагментов, и для среднего угла разориентации θ в рамках зерна записывается соотношение на основе известной зависимости [98,232]:

$$\dot{\theta} = \beta \frac{b}{2} (\rho_{GND})^{-1/2} \dot{\rho}_{GND}, \quad (4.9)$$

где $\rho_{GND} = \sum_{k=1}^K \rho_{GND}^{(k)}$ – суммарное значение плотности ГНД на системах скольжения в рамках эффективного фрагмента, β – коэффициент.

В рамках ДМ соотношение (4.9) описывает в среднем разориентацию фрагментов в зерне. При этом при деформировании реального материала при увеличении разориентации между фрагментами (блоками ячеек, субзернами) происходит увеличение числа новых зерен в поликристалле за счет трансформации в них фрагментов. Однако в разрабатываемой ДМ реализуется

работа с постоянным количеством зерен в ПО, для описания изменения средних размеров которых вводится соответствующая внутренняя переменная модели. Принятие указанной гипотезы связано с необходимостью сохранения относительной простоты и умеренной вычислительной ресурсоемкости модели.

По вычисленным в соотношениях (4.8), (4.9) для отдельных эффективных фрагментов характеристикам далее определяются величины для всего поликристалла в целом. Заметим, что в уравнениях ниже используются величины, полученные объемным осреднением по всем составляющим ПО зернам.

5. Описание изменения удельной площади границ фрагментов и границ зерен

Для описания процесса фрагментации вводится удельная к объему всего поликристалла площадь границ фрагментов S_f [233,234]. В работе учитывается изменение S_f за счет двух механизмов. Первый механизм описывает формирование границ фрагментов, в рамках которого происходит увеличение удельной площади при перестройке дислокационной структуры в ходе деформирования. Второй механизм учитывает уменьшение удельной площади границ фрагментов при трансформации их в границы зерен в ходе разворотов. Тогда эволюционное соотношение для удельной площади границ фрагментов в ПО можно записать следующим образом [233,234]:

$$\dot{S}_f = \dot{S}_f^+ + \dot{S}_f^-, \quad \dot{S}_f^+ = \zeta_1 (b/\theta_0) \bar{\dot{\rho}}_{GND}, \quad \dot{S}_f^- = -\zeta_2 S_f \bar{\dot{\theta}}, \quad (4.10)$$

где θ_0 – угол разориентации новообразованной границы фрагмента, ζ_1 , ζ_2 – константы, описывающие долю влияния соответствующих механизмов,

$\bar{\dot{\rho}}_{GND} = \sum_{i=1}^{N_g} w^{(i)} \dot{\rho}_{GND}^{(i)}$ – средняя по объему скорость изменения суммарной плотности

ГНД, $\bar{\dot{\theta}} = \sum_{i=1}^{N_g} w^{(i)} \dot{\theta}^{(i)}$ – среднее по объему значение скорости изменения угла

разориентации фрагментов, $w^{(i)} = \left(d_f^{(i)}\right)^3 / \sum_{j=1}^{N_g} \left(d_f^{(j)}\right)^3$ – объемная доля эффективного фрагмента i в ПО, вычисляемая по среднему размеру фрагментов в зерне (4.8).

По аналогии с границами фрагментов для границ зерен в рамках ПО также можно ввести величину удельной площади S_g и записать соотношение для её эволюции, которое учитывает изменение удельной площади границ зерен за счет разворотов фрагментов [233,234]:

$$\dot{S}_g = \eta S_g \bar{\dot{\theta}}, \quad (4.11)$$

где η – константа.

6. Описание эволюции среднего размера фрагментов и среднего размера зерна

Средний размер фрагментов в поликристалле вычисляется объемным осреднением по размерам эффективных фрагментов в отдельных зернах:

$$\bar{d}_f = \sum_{i=1}^{N_g} w^{(i)} d_f^{(i)}. \quad (4.12)$$

В поликристалле $\bar{d}_f$ вводится по аналогии с модифицированной моделью ЕТМВ [146] для описания процесса фрагментации с учетом дислокационных процессов, происходящих на уровне отдельных фрагментов в зерне. При этом в ДМ дополнительно вводится средний размер зерна в ПО, который определяется с учетом переходов фрагментов в новые зерна. Совокупность введенных соотношений позволяет более адекватно описать процесс фрагментации на начальных этапах деформирования.

Для описания эволюции среднего размера зерна в поликристалле используется стереологическое соотношение, основанное на удельной площади границ зерен в ПО [233,234]:

$$d_g = 2/S_g. \quad (4.13)$$

Совокупность вышеприведенных соотношений (4.3)–(4.13) составляет ДМ. В разделе 1.3 в рамках методики математического моделирования по построению целевой модели были обозначены предложенные в работе структуры прямой модели с явным описанием каждого объекта микроструктуры, детализированной модели и разработанная приближенная КМ с подмоделью ЕТМВ – как этапы, необходимые для создания целевой КМ–ДМ. В таблице 4.1 содержится краткий сравнительный анализ предложенных моделей фрагментации (схематично сопоставление представлено на рисунке 1.2).

Таблица 4.1. Сравнение предложенных моделей фрагментации

Модель	Краткая характеристика	Замыкающие (феноменологические) уравнения
Прямая модель (описана структура модели, численно не реализуется)	Для моделирования процесса измельчения применяется подход дискретной дислокационной динамики, с помощью которого явным образом описываются изменения размеров отдельно рассматриваемых ячеек, плотностей дислокаций в стенках и внутренностях, а также их разворотов друг относительно друга. По размерам отдельных ячеек определяется размер содержащего их блока; по размерам блоков вычисляется размер конкретного зерна в поликристалле. Развороты блоков определяются также на основе разворотов отдельных ячеек. Для учета образования новых зерен и блоков в модели вводятся основанные на углах разориентации блоков и ячеек критерии.	соотношения дискретной дислокационной динамики для описания движения и взаимодействия дислокаций.

Таблица 4.1. Продолжение

Детализированная модель (описана структура модели, численно не реализуется)	При моделировании процесса измельчения явно учитываются изменения размеров отдельных блоков и их повороты в зерне. При этом в блоке эффективным образом описывается эволюция размеров ячеек и углов их разориентации на основе плотностей дислокаций внутри блока и в его границе. Для учета образования новых зерен и блоков в модели вводятся основанные на углах разориентации блоков и ячеек критерии.	- уравнения для эволюции плотностей статистически накопленных дислокаций; - уравнения для эволюции плотностей геометрически необходимых дислокаций.
Модификация модели ЕТМВ (подробное описание, результаты численной реализации – глава 3)	Для эффективного (в среднем) описания процесса измельчения зерен (через эволюцию среднего размера ячеек) применяется гипотеза о трансформации ячеек в новые зерна при очень больших деформациях, при этом явно размер зерна в модели не учитывается. Средний размер ячеек в модели зависит от плотности дислокаций, эволюция которой определяется различными дислокационными процессами в стенках и внутренностях ячеек.	уравнения для изменения плотности дислокаций во внутренностях и стенках ячейки.
Дислокационная модель (целевая модель, подробное описание, результаты численной	Для моделирования фрагментации используется углубленное комплексное описание процесса за счет учета эволюции плотностей статистически накопленных и	уравнения для эволюции плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций.

Таблица 4.1. Продолжение

реализации – глава 4)	геометрически необходимых дислокаций, среднего размера фрагментов и их разворотов. Ключевым отличием от модели ЕТМВ является явный учет изменения среднего размера зерна, что позволяет более адекватно описать фрагментацию зерен не только в процессах ИПД, но и в процессах ОМД.	
--------------------------	--	--

4.2. Результаты применения многоуровневой конститутивной модели на базе континуальной дислокационной динамики для описания равноканального углового прессования меди

В разделе приведены результаты моделирования фрагментации зерен при равноканальном угловом прессовании меди при комнатной температуре с помощью описанной в главе 2 базовой статистической КМ ФТП [30] с дислокационной моделью, соотношения которой приведены в разделе 4.1.

Для приближенного моделирования РКУП по маршруту В_с при $\Phi = 90^\circ$, $\Psi = 20^\circ$ в двухуровневой статистической КМ использовался кинематический способ определения нагружения, описанный в разделе 3.2. Для исследования влияния РКУП на механические свойства образца в настоящем разделе аналогично разделу 3.2 проводился расчет для квазиодноосного растяжения заготовки вдоль оси Ох₁ ЛСК $\mathbf{L}(t) = \dot{\epsilon} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3$ со скоростью деформации $\dot{\epsilon} = 3.3 \cdot 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ без предварительной обработки РКУП и после различного числа проходов.

Для проведения процедуры идентификации и отображения результатов моделирования вычислялись интенсивность напряжений $\sigma_M = \sqrt{3/2 \mathbf{S} : \mathbf{S}}$,

интенсивность накопленных деформаций $\varepsilon_M = \int_0^t \sqrt{2/3 \mathbf{D}_{dev}(t) : \mathbf{D}_{dev}(t)} dt$, средняя

для ПО общая плотность дислокаций на системах скольжения

$\rho_{tot} = \frac{1}{N_g} \sum_{i=1}^{N_g} \sum_{j=1}^K \left(\rho_{SSD}^{(i)(j)} + \rho_{GND}^{(i)(j)} \right)$, для чего использовались девиатор напряжений

$\mathbf{S} = \mathbf{K} - 1/3 I_1(\mathbf{K}) \mathbf{I}$ и девиатор симметричной части градиента скорости перемещений $\mathbf{D}_{dev}(t) = \mathbf{D}(t) - 1/3 I_1(\mathbf{D}(t)) \mathbf{I}$.

В ходе процедуры идентификации, методика которой для базовой КМ описана в разделе 2.2, с использованием платформы IOSO [157], возможности которой включают в себя многокритериальную и многопараметрическую оптимизацию сложных нелинейных систем, подбирались такие значения параметров модели, при которых достигается оптимальное соответствие экспериментальным данным по напряжениям течения при растяжении образца без предварительного РКУП $\sigma_M(\varepsilon_M)$, общей плотности дислокаций $\rho_{tot}(j)$ и среднему размеру зерна $d_g(j)$ после различного числа проходов РКУП $j = \overline{1, N_{pass}}$. Верификация результатов моделирования осуществлялась по пределам текучести на растяжение $\sigma_{0.2}(j)$ и текстурам после различного числа проходов РКУП $j = \overline{1, N_{pass}}$, N_{pass} – общее число рассматриваемых проходов РКУП.

При этом часть параметров является известными справочными данными и их значения были взяты из литературных источников [91,127,151,214]. В таблице 4.2 приведены значения и источник определения параметров моделей.

Таблица 4.2. Параметры КМ и ДМ для меди

Π_{1111}	Π_{1122}	Π_{1212}	q_{lat}	m	τ_{c0}	b	G
168.4 ГПа [214]	121.4 ГПа [214]	75.4 ГПа [214]	1.4 [151]	83.3 [151]	0.008 ГПа*	$2.56 \cdot 10^{-10}$ м [91]	44.7 ГПа [91]
ν_0	ξ	α_{BH}	k_{HPf}	k_{HPg}	K_f	β	ζ_1
10^{-7} м/с	0.5 [127]	0.0222	10^{-6} ГПа·м ^{1/2}	10^{-4} ГПа·м ^{1/2}	14.4	$4.9 \cdot 10^3$	$4.7 \cdot 10^3$
ζ_2	η	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5	α_6
45	0.1	0.57	3.0	0.1	0.03	0.018	2.0
α_7	α_8	α_9	α_{10}	$\rho_{GND} _{t=0}$	$\rho_{m,im} _{t=0}$	$\theta _{t=0}$	$d_g _{t=0}$
0.06	0.003	1.0	0.005	10^{12} м ⁻²	$1.4 \cdot 10^{13}$ м ⁻²	0.2°	60 мкм [235]

*Значения параметров, определенные в процедуре идентификации, приведены без ссылок на литературный источник.

На рисунке 4.2 приведена зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций для растяжения вдоль оси Ox_1 ЛСК без предварительного РКУП.

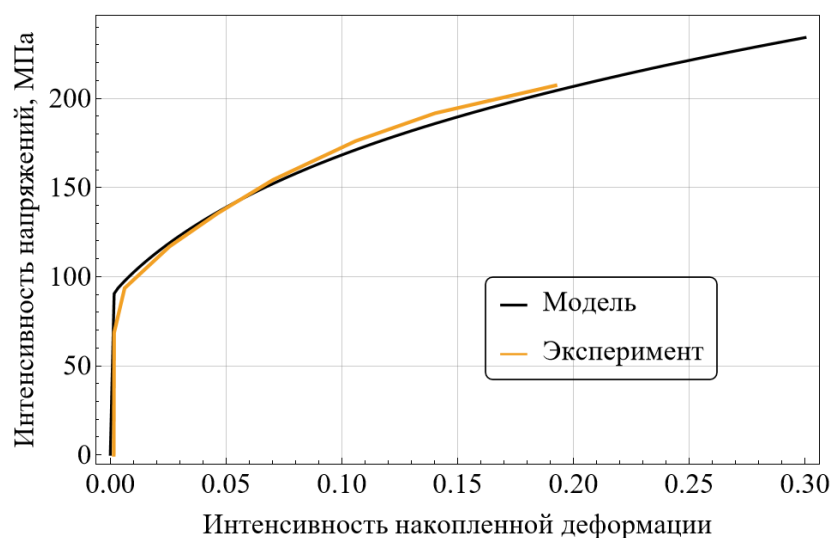


Рисунок 4.2. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленной деформации для растяжения вдоль оси Ox_1 ЛСК без предварительного РКУП

Согласно результатам на рисунке 4.2, разработанная модель корректно описывает монотонное нагружение образца. Полученные результаты по пределам текучести на растяжение после одного и двух проходов РКУП по маршруту В_с (270 МПа и 384 МПа соответственно) удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными, приведенными в работе [215] (295 МПа и 372 МПа).

При неупругом деформировании материалов уже на начальных этапах в них образуется характерная для проводимого процесса нагружения текстура, которая оказывает существенное влияние на дальнейший процесс деформирования и свойства материала. Прямые полюсные фигуры на рисунке 4.3, полученные в двухуровневой статистической КМ, качественно соответствуют экспериментальным текстурам, приведенным в [212]. По результатам на рисунке 4.3 видно, что текстуры в зависимости от прохода не меняют своего положения относительно плоскости сдвига, которая для РКУП по маршруту В_с меняется от прохода к проходу. Плоскостью сдвига на рисунке 4.3 является плоскость НЭ–ПН, где НЭ – направление экструзии, ПН – перпендикулярное НЭ направление.

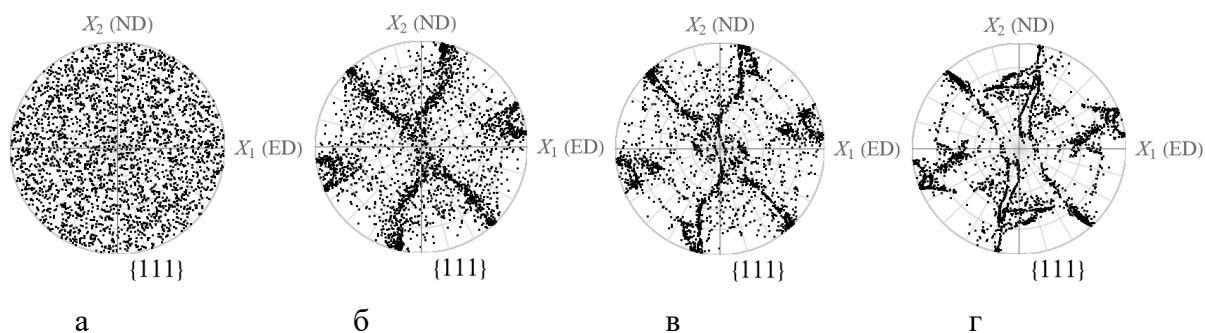


Рисунок 4.3. Текстуры после различного числа проходов РКУП по маршруту В_с: (а) начальная, (б) после первого прохода, (в) после второго прохода, (г) после четвертого прохода

На рисунке 4.4 приведены зависимости средних по поликристаллу плотностей дислокаций, среднего размера фрагментов и среднего размера зерна от интенсивности накопленной деформации после четырех проходов РКУП по маршруту В_с.

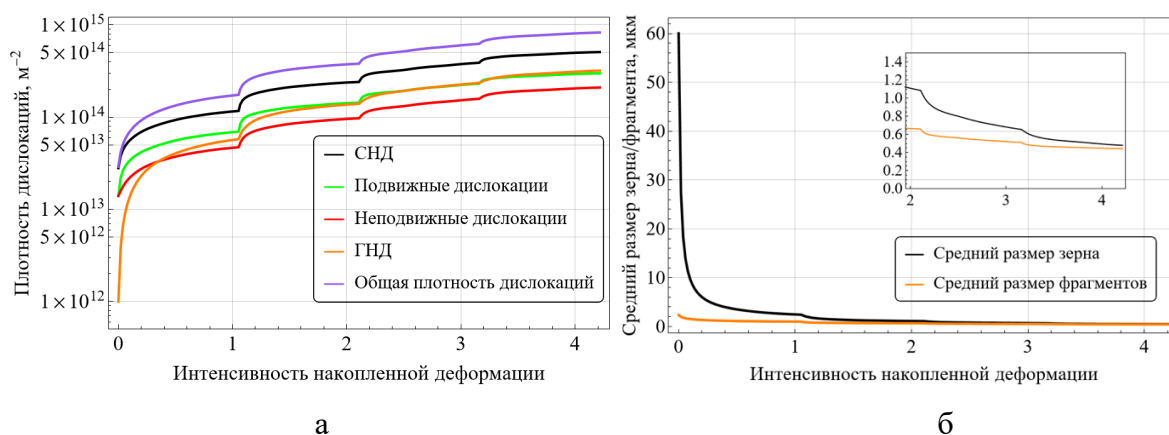


Рисунок 4.4. Зависимости (а) плотности дислокаций, (б) среднего размера фрагментов и среднего размера зерна от интенсивности накопленной деформации после четырех проходов РКУП по маршруту Вс

По результатам на рисунке 4.4а можно заключить, что разработанная ДМ качественно описывает экспериментальную зависимость плотностей дислокаций от числа проходов РКУП [235] и соответствует рассчитанным по модели ЕТМВ данным [215]. Результаты моделирования демонстрируют резкий рост плотности после первого прохода, который вызван сменой траектории нагружения в начале второго этапа деформирования. При изменении направления нагружения в КМ активируются неактивные на первом этапе системы скольжения, на которых плотность дислокаций не изменилась (или изменилась незначительно) за первый проход. Это приводит к тому, что при втором проходе согласно уравнениям (4.4), (4.6), (4.7) плотности дислокаций на системах скольжения активно растут за счет генерации дислокаций. Похожая картина наблюдается на третьем и четвертом проходах, но в меньшей степени, так как распределение плотностей дислокаций на системах скольжения становится более однородным. Возможным направлением развития предложенной ДМ (и аппарата континуальной дислокационной динамики в целом) является модификация соотношений (4.4), (4.6), (4.7) более детальным учетом дислокационных реакций, проявляющихся при нагружениях с изломом траектории деформирования.

Данные рисунка 4.4б показывают, что полученные в ДМ значения среднего размера зерна после четвертого прохода РКУП (0.5 мкм) удовлетворительно соответствует экспериментальным данным [235] (0.3 мкм) и [215] (0.7 мкм). Также полученные зависимости среднего размера зерна от числа проходов в целом соответствуют результатам работ с использованием других моделей фрагментации [91,215]. При больших деформациях (после четвертого прохода РКУП) средний размер зерна и средний размер фрагментов практически совпадают, что согласуется с известным в литературе фактом [236]. Заметим, что в ранее предложенной модификации модели ЕТМВ, описанной в главе 3, средний размер ячейки получался меньше среднего размера фрагмента и среднего размера зерна в ДМ, что иллюстрирует лучшую адекватность разработанной КМ–ДМ.

На рисунке 4.5 приведена зависимость среднего угла разориентации фрагментов после четырех проходов РКУП от интенсивности накопленной деформации, которая качественно согласуется с расчетными и экспериментальными данными [215].

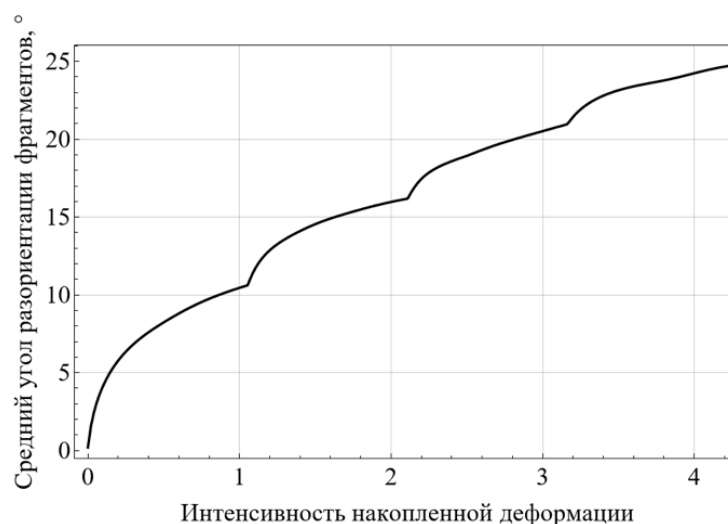


Рисунок 4.5. Зависимость среднего угла разориентации фрагментов в ПО от интенсивности накопленной деформации

Разработанная многоуровневая КМ для описания напряженно-деформированного состояния и фрагментации зерен материала относится к классу статистических моделей, которые, как отмечено во введении, являются

более вычислительно эффективными по сравнению с самосогласованными и прямыми моделями. При численной реализации модели использовался компонентно-ориентированный подход к программированию [237], что в совокупности с использованием оптимизированной библиотеки векторно-матричной алгебры и апробированных численных схем [30] позволило создать эффективные численные реализации разработанной многоуровневой КМ.

Заключение

Диссертация посвящена развитию аппарата многоуровневых конститутивных моделей металлов и сплавов, позволяющих улучшать процессы изготовления промышленных деталей и конструкций методами обработки металлов давлением и/или интенсивной пластической деформации, путем совершенствования описания фрагментации зеренной структуры. На основе проведенного обзора экспериментальных исследований выявлены ключевые механизмы деформирования, реализующиеся при измельчении. В ходе обзора теоретических исследований установлено, что в настоящее время отсутствует модель, которая углубленно описывает процесс фрагментации зерен и при этом является вычислительно эффективной. Целью работы являлось создание вычислительно эффективной многоуровневой конститутивной модели для описания напряженно-деформированного состояния и фрагментации зерен поликристаллических металлов, которая с детальностью, достаточной для углубленного моделирования технологических процессов обработки металлов, описывает физические процессы измельчения зерен при деформировании.

Основные результаты диссертационной работы заключаются в следующем:

1. Проведен обзор экспериментальных исследований по процессу фрагментации зеренной структуры металлов и сплавов. Выявлены ключевые физические особенности изменения внутренней структуры и механизмов деформирования в ходе рассматриваемого процесса.
2. Выполнен анализ устойчивости базовой двухуровневой статистической конститутивной модели. С её помощью описаны нагружения с изломом траектории деформирования.
3. Проведен обзор существующих моделей фрагментации и на его основе впервые в базовую двухуровневую конститутивную модель интегрирована модель измельчения ЕТМВ для приближенного описания процесса измельчения; проведена модификация её

соотношений. Выявлено актуальное направление развития многоуровневых конститутивных моделей.

4. Создана новая двухуровневая статистическая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики для комплексного описания фрагментации зерен в ходе технологических процессов обработки металлов. Предложенная модель совокупно учитывает эволюцию плотностей статистически накопленных и геометрически необходимых дислокаций, значений среднего размера фрагментов и зерен, угла разориентации фрагментов.
5. Разработаны алгоритмы и программные численные реализации указанных в п. 3 и п. 4 моделей. Получены результаты моделирования простых и сложных нагружений металлов, проведен их анализ и сопоставление с экспериментальными данными, которое свидетельствует об удовлетворительном их соответствии.

Литература

1. Начала металлургии: Учебник для вузов / В.И. Коротич, С.С. Набойченко и др.; под ред. В.И. Коротича. – Екатеринбург: УГТУ, 2000. – 392 с.
2. Симонов Ю.Н., Белова С.А., Симонов М.Ю. Металлургические технологии. – Пермь: Издательство ПНИПУ, 2012. – 293 с.
3. Segal V.M., Reznikov V.I., Dobryshevskiy A.E., Kopylov V.I. Plastic working of metals by simple shear // Russian metallurgy (Metally). – 1981. – V. 1. – P. 99–105.
4. Valiev R.Z., Langdon T.G. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement // Progress in Materials Science. – 2006. – V. 51, No. 7. – P. 881–981.
5. Zhilyaev A.P., Langdon T.G. Using high-pressure torsion for metal processing: Fundamentals and applications // Progress in Materials Science. – 2008. – V. 53, No. 6. – P. 893–979.
6. Edalati K., Horita Z. A review on high-pressure torsion (HPT) from 1935 to 1988 // Materials Science and Engineering: A. – 2016. – V. 652. – P. 325–352.
7. Tsuji N., Saito Y., Lee S.-H., Minamino Y. ARB (Accumulative Roll-Bonding) and other new techniques to produce bulk ultrafine grained materials // Advanced Engineering Materials. – 2003. – V. 5, No. 5. – P. 338–344.
8. Jamaati R., Toroghinejad M.R., Edris H. Effect of stacking fault energy on nanostructure formation under accumulative roll bonding (ARB) process // Materials Science and Engineering: A. – 2013. – V. 578. – P. 191–196.
9. Sitdikov O., Sakai T., Goloborodko A., Miura H., Kaibyshev R. Effect of pass strain on grain refinement in 7475 Al alloy during hot multidirectional forging // Materials Transactions. – 2004. – V. 45. – P. 2232–2238.
10. Abdulstaar M.A., El-Danaf E.A., Waluyo N.S., Wagner L. Severe plastic deformation of commercial purity aluminum by rotary swaging: Microstructure evolution and mechanical properties // Materials Science and Engineering: A. – 2013. – V. 565. – P. 351–358.

11. Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: a wealth of challenging science // *Acta Materialia*. – 2013. – V. 61, No. 3. – P. 782–817.
12. Edalati K., Bachmaier A., Beloshenko V.A., Beygelzimer Y. et al Nanomaterials by severe plastic deformation: review of historical developments and recent advances // *Materials Research Letters*. – 2022. – V. 10, No. 4. – P. 163–256.
13. Baik S.C., Estrin Y., Kim H.S., Hellmig R.J. Dislocation density-based modeling of deformation behavior of aluminium under equal channel angular pressing // *Materials Science and Engineering: A*. – 2003. – V. 351, No. 1. – P. 86–97.
14. Mishra A., Kad B.K., Gregori F., Meyers M.A. Microstructural evolution in copper subjected to severe plastic deformation: experiments and analysis // *Acta Materialia*. – 2007. – V. 55, No. 1. – P. 13–28.
15. Рудской А.И., Коджаспиров Г.Е. Технологические основы получения ультрамелкозернистых металлов: учебное пособие. – СПб: Изд-во Политехнического университета, 2012. – 247 с.
16. Фридель Ж. Дислокации. – М: Мир, 1967. – 644 с.
17. Хирт Дж., Лотэ И. Теория дислокаций. – М: Атомиздат, 1972. – 599 с.
18. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М: Мир, 1972. – 408 с.
19. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М: Металлургия, 1986. – 224 с.
20. Kuhlmann-Wilsdorf D. Deformation Bands, the LEDS Theory, and Their Importance in Texture Development: Part II. Theoretical Conclusions // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 1999. – V. 30. – P. 2391–2401.
21. Prinz F., Argon A.S., Moffatt W.C. Recovery of dislocation structures in plastically deformed copper and nickel single crystals // *Acta Metallurgica*. – 1982. – V. 30, No. 4. – P. 821–830.
22. Argon A.S., Moffatt W.C. Climb of extended edge dislocations // *Acta Metallurgica*. – 1981. – V. 29, No. 2. – P. 293–299.

23. Püschl W. Models for dislocation cross-slip in close-packed crystal structures: a critical review // *Progress in Materials Science*. – 2002. – V. 47, No. 4. – P. 415–461.
24. Langdon T.G. Twenty-five years of ultrafine-grained materials: Achieving exceptional properties through grain refinement // *Acta Materialia*. – 2013. – V. 61, No. 19. – P. 7035–7059.
25. Sakai T., Belyakov A., Kaibyshev R., Miura H., Jonas J.J. Dynamic and post-dynamic recrystallization under hot, cold and severe plastic deformation conditions // *Progress in Materials Science*. – 2014. – V. 60. – P. 130–207.
26. Zhou G., Li Z., Li D., Peng Y., Zurob H. S., Wu P. A polycrystal plasticity based discontinuous dynamic recrystallization simulation method and its application to copper // *International Journal of Plasticity*. – 2017. – V. 91. – P. 48–76.
27. Alaneme K.K., Okotete E.A. Recrystallization mechanisms and microstructure development in emerging metallic materials: A review // *Journal of Science: Advanced Materials and Devices*. – 2019. – V. 4, No. 1. – P. 19–33.
28. Trusov P., Kondratev N., Podsedertsev A. Description of dynamic recrystallization by means of an advanced statistical multilevel model: grain structure evolution analysis // *Crystals*. – 2022. – V. 12, No. 5. – 653.
29. Trusov P., Kondratev N., Podsedertsev A. Grain structure rearrangement by means the advanced statistical model modified for describing dynamic recrystallization // *Metals*. – 2023. – V. 13, No. 1. – 113.
30. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с.
31. Cao Y., Ni S., Liao X., Song M., Zhu Y. Structural evolutions of metallic materials processed by severe plastic deformation // *Materials Science and Engineering: R: Reports*. – 2018. – V. 133. – P. 1–59.
32. Valiev R.Z., Alexandrov I.V., Kawasaki M., Langdon T.G. Ultrafine-grained materials. – Cham: Springer International Publishing, 2024. – 177 p.

33. 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.
34. Kuhlmann-Wilsdorf D., Van Der Merwe J.H. Theory of dislocation cell sizes in deformed metals // Materials Science and Engineering. – 1982. – V. 55, No. 1. – P. 79–83.
35. Mughrabi H. Dislocation wall and cell structures and long-range internal stresses in deformed metal crystals // Acta Metallurgica. – 1983. – V. 31, No. 9. – P. 1367–1379.
36. Bay B., Hansen N., Hughes D.A., Kuhlmann-Wilsdorf D. Overview no. 96 evolution of f.c.c. deformation structures in polyslip // Acta Metallurgica et Materialia. – 1992. – V. 40, No. 2. – P. 205–219.
37. Estrin Y., Toth L.S., Molinari A., Brechet Y. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation // Acta Materialia. – 1998. – V. 46, No. 15. – P. 5509–5522.
38. Козлов Э.В., Конева Н.А., Жданов А.Н., Попова Н.А., Иванов Ю.Ф. Структура и сопротивление деформированию ГЦК ультрамелкозернистых металлов и сплавов // Физическая мезомеханика. – 2004. – Т. 7, №. 4. – С. 93–113.
39. Панин В.Е., Егорушкин В.Е. Физическая мезомеханика измельчения кристаллической структуры при интенсивной пластической деформации // Физическая мезомеханика. – 2008. – Т. 11, №. 5. – С. 5–16.
40. Hansen N., Barlow C.Y. 17 – Plastic deformation of metals and alloys // Physical Metallurgy (Fifth Edition) / ed. by D. E. Laughlin, K. Hono. – Oxford: Elsevier, 2014. – P. 1681–1764.
41. Dolzhenko P., Tikhonova M., Odnobokova M., Kaibyshev R., Belyakov A. Ultrafine-grained stainless steels after severe plastic deformation // Metals. – 2023. – V. 13, No. 4. – 674.

42. Handbook of materials modeling: methods: theory and modeling / ed. by W. Andreoni, S. Yip. – Cham: Springer International Publishing, 2020. – 1971 p.
43. McMeeking R.M., Rice J.R. Finite-element formulations for problems of large elastic-plastic deformation // International Journal of Solids and Structures. – 1975. – V. 11, No. 5. – P. 601–616.
44. Osias J.R., Swedlow J.L. Finite elasto-plastic deformation–I: Theory and numerical examples // International Journal of Solids and Structures. – 1974. – V. 10, No. 3. – P. 321–339.
45. Roters F., Diehl M., Shanthraja P., Eisenlohr P. et al DAMASK – The Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit for modeling multi-physics crystal plasticity, thermal, and damage phenomena from the single crystal up to the component scale // Computational Materials Science. – 2019. – V. 158. – P. 420–478.
46. Horstemeyer M.F., Bammann D.J. Historical review of internal state variable theory for inelasticity // International Journal of Plasticity. – 2010. – V. 26, No. 9. – P. 1310–1334.
47. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermomechanics (1893–2013) // Mechanics Research Communications. – 2015. – V. 69. – P. 79–86.
48. Рыбин В.В., Перевезенцев В.Н., Свирина Ю.В. Физическая модель начальных стадий фрагментации поликристаллов в ходе развитой пластической деформации // Физика металлов и металловедение. – 2017. – Т. 118, №. 12. – P. 1243–1247.
49. Лихачев В.А., Малинин В.Г. Структурно-аналитическая теория прочности. – СПб: Наука, 1993. – 471 с.
50. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Макаров П.В. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. В двух томах. Т. 1. – Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма РАН, 1995. – 298 с.

51. Панин В.Е., Макаров П.В., Псахье С.Г. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В двух томах. Т. 2. – Новосибирск: Наука. Сибирская издательская фирма РАН, 1995. – 320 р.
52. Вильдеман В.Э., Соколкин Ю.В., Ташкинов А.А. Механика неупругого деформирования и разрушения композиционных материалов. – М: Наука, 1997. – 288 с.
53. Макаров П.В. Моделирование процессов деформации и разрушения на мезоуровне // Известия РАН. Механика твердого тела. – 1999. – №. 5. – С. 109–130.
54. Романова В.А., Балохонов Р.Р., Панин А.В., Батухтина М.С., Казаченок М.С., Шахиджанов В.С. Микромеханическая модель эволюции деформационного рельефа в поликристаллических материалах // Физическая мезомеханика. – 2017. – Т. 20, №. 3. – С. 81–90.
55. Волков А.Е. Микроструктурное моделирование деформации сплавов при повторяющихся мартенситных превращениях // Известия Российской Академии Наук. Серия физическая. – 2002. – Т. 66, №. 9. – С. 1290–1297.
56. Семенов А.С. Микроструктурная модель сегнетоэлектрoупругого материала с учетом эволюции дефектов // Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки. – 2021. – Т. 14, №. 1. – С. 32–57.
57. Vakhrouchev A.V. Modelling of the nanosystems formation by the molecular dynamics, mesodynamics and continuum mechanics methods // Multidiscipline Modeling in Materials and Structures. – 2009. – V. 5, No. 2. – P. 99–118.
58. Krivilyov M., Volkmann T., Gao J., Fransaer J. Multiscale analysis of the effect of competitive nucleation on phase selection in rapid solidification of rare-earth ternary magnetic materials // Acta Materialia. – 2012. – V. 60, No. 1. – P. 112–122.
59. Кривцов А.М. Описание пластических эффектов при молекулярно-динамическом моделировании откольного разрушения // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46, №. 6. – С. 1025–1030.

60. Псахье С.Г., Остермайер Г.П., Дмитриев А.И., Шилько Е.В., Смолин А.Ю., Коро-стелев С.Ю. Метод подвижных клеточных автоматов как новое направление дискретной вычислительной механики. I. Теоретическое описание // Физическая мезомеханика. – 2000. – Т. 3, №. 2. – С. 5–13.
61. Akimenko S.S., Myshlyavtsev A.V., Myshlyavtseva M.D. Ashkin–Teller model on a sequence of hierarchical lattices // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2023. – V. 620. – 128776.
62. 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. 49–65.
63. Trusov P.V., Shveykin A.I., Kondratev N.S. Multilevel metal models: formulation for large displacement gradients // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2017. – V. 8, No. 2. – P. 133–166.
64. Trusov P.V., Gribov D.S. The three-level elastoviscoplastic model and its application to describing complex cyclic loading of materials with different stacking fault energies // Materials. – 2022. – V. 15, No. 3. – 760.
65. Швейкин А.И., Вшивкова А.И., Трусов П.В. Двухуровневая конститутивная модель металла с комплексным учетом изменяющихся температурно-скоростных условий // Физическая мезомеханика. – 2024. – Т. 27, №. 2. – С. 50–68.
66. Shveykin A.I., Trusov P.V. Multilevel models of polycrystalline metals: comparison of relations describing the crystallite lattice rotations // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2019. – V. 10, No. 1. – P. 1–20.
67. Trusov P., Shveykin A., Kondratev N. Some issues on crystal plasticity models formulation: motion decomposition and constitutive law variants // Crystals. – 2021. – V. 11, No. 11. – 1392.

68. 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. Механика. – 2013. – №. 4. – С. 75–105.
69. Shveykin A., Trusov P., Sharifullina E. Statistical crystal plasticity model advanced for grain boundary sliding description // Crystals. – 2020. – V. 10, No. 9. – 822.
70. Trusov P., Kondratev N., Baldin M., Bezverkhy D. A multilevel physically based model of recrystallization: analysis of the influence of subgrain coalescence at grain boundaries on the formation of recrystallization nuclei in metals // Materials. – 2023. – V. 16, No. 7. – 2810.
71. Трусов П.В., Янц А.Ю., Теплякова Л.А. Прямая физическая упруговязкопластическая модель: приложение к исследованию деформирования монокристаллов // Физическая мезомеханика. – 2018. – Т. 21, №. 2. – С. 33–44.
72. Yants A.Y., Trusov P.V., Tokarev A.A. Direct crystal plasticity model for describing the deformation of samples of polycrystalline materials: influence of external and internal boundaries of samples // Nanoscience and Technology: An International Journal. – 2021. – V. 12, No. 2. – P. 1–21.
73. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, №. 5. – С. 5–30.
74. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, №. 4. – С. 17–28.
75. Lebensohn R.A., Tomé C.N. A self-consistent anisotropic approach for the simulation of plastic deformation and texture development of polycrystals:

- Application to zirconium alloys // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1993. – V. 41, No. 9. – P. 2611–2624.
76. Остапович К.В. Проектирование рационально текстурированных поликристаллических изделий на основе двухуровневой статистической модели упруговяз-копластического деформирования: диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук / Остапович Кирилл Вадимович, 2023. – 123 с.
77. Beygelzimer Y. Grain refinement versus voids accumulation during severe plastic deformations of polycrystals: mathematical simulation // *Mechanics of Materials*. – 2005. – V. 37, No. 7. – P. 753–767.
78. Petryk H., Stupkiewicz S. A quantitative model of grain refinement and strain hardening during severe plastic deformation // *Materials Science and Engineering: A*. – 2007. – V. 444, No. 1. – P. 214–219.
79. Zhilyaev A.P., Swaminathan S., Pshenichnyuk A.I., Langdon T.G., McNelley T.R. Adiabatic heating and the saturation of grain refinement during SPD of metals and alloys: experimental assessment and computer modeling // *Journal of Materials Science*. – 2013. – V. 48, No. 13. – P. 4626–4636.
80. Silbermann C.B., Shutov A.V., Ihlemann J. Modeling the evolution of dislocation populations under non-proportional loading // *International Journal of Plasticity*. – 2014. – V. 55. – P. 58–79.
81. Rzhavtsev E.A., Gutkin M.Yu. The dynamics of dislocation wall generation in metals and alloys under shock loading // *Scripta Materialia*. – 2015. – V. 100. – P. 102–105.
82. Borodin E.N., Bratov V. Non-equilibrium approach to prediction of microstructure evolution for metals undergoing severe plastic deformation // *Materials Characterization*. – 2018. – V. 141. – P. 267–278.
83. Firouzabadi S.S., Kazeminezhad M. Cell-structure and flow stress investigation of largely strained non-heat-treatable Al-alloys using dislocation based model // *Materials Science and Engineering: A*. – 2019. – V. 739. – P. 167–172.

84. Cao S.C., Zhang X., Yuan Y., Wang P., Zhang L., Liu N., Liu Y., Lu J. A constitutive model incorporating grain refinement strengthening on metallic alloys // *Journal of Materials Science and Technology*. – 2021. – V. 88. – P. 233–239.
85. Орлова Т.С., Назаров А.А., Еникеев Н.А., Александров И.В., Валиев Р.З., Романов А.Е. Измельчение зеренной структуры поликристаллов в ходе пластической деформации за счет релаксации стыковых дисклинационных конфигураций // *Физика твердого тела*. – 2005. – Т. 47, №. 5. – С. 820–826.
86. Nazarov A.A., Enikeev N.A., Romanov A.E., Orlova T.S., Alexandrov I.V., Beyerlein I.J., Valiev R.Z. Analysis of substructure evolution during simple shear of polycrystals by means of a combined viscoplastic self-consistent and disclination modeling approach // *Acta Materialia*. – 2006. – V. 54, No. 4. – P. 985–995.
87. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Microstructural modeling of grain subdivision and large strain inhomogeneous deformation modes in f.c.c. crystalline materials // *Mechanics of Materials*. – 2006. – V. 38, No. 12. – P. 1159–1169.
88. Enikeev N.A., Abdullin M.F., Nazarov A.A., Beyerlein I.J. Modelling grain refinement in fcc metals during equal-channel angular pressing by route “C” // *International Journal of Materials Research*. – 2007. – V. 98, No. 3. – P. 167–171.
89. Frydrych K., Kowalczyk-Gajewska K. A three-scale crystal plasticity model accounting for grain refinement in fcc metals subjected to severe plastic deformations // *Materials Science and Engineering: A*. – 2016. – V. 658. – P. 490–502.
90. Frydrych K., Kowalczyk-Gajewska K. Grain refinement in the equal channel angular pressing process: simulations using the crystal plasticity finite element method // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. – 2018. – V. 26, No. 6. – 065015.
91. Kobaissy A.H., Ayoub G., Toth L.S, Mustapha S., Shehadeh M. Continuum dislocation dynamics-based grain fragmentation modeling // *International Journal of Plasticity*. – 2019. – V. 114. – P. 252–271.

92. Kobaissy A.H., Ayoub G., Nasim W., Malik J., Karaman I., Shehade M. Modeling of the ECAP induced strain hardening behavior in FCC metals // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2020. – V. 51, No. 10. – P. 5453–5474.
93. Toth L.S., Molinari A., Estrin Y. Strain hardening at large strains as predicted by dislocation based polycrystal plasticity model // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2002. – V. 124, No. 1. – P. 71–77.
94. Романов К.А., Швейкин А.И., Трусков П.В. Программная реализация модели ЕТМВ: модуль для описания измельчения зерен в двухуровневой статистической конститутивной модели. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024668653 от 9 августа 2024 г.
95. Романов К.А., Кондратьев Н.С., Швейкин А.И., Трусков П.В. Реализация многоуровневых конститутивных моделей материалов: интеграционный модуль для статистических моделей. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2024691996 от 25 декабря 2024 г.
96. Zhao X., Song K., Huang H., Yan Y., Su Y., Qian P. Effect of alloying elements on the stacking fault energy and ductility in Mg₂Si intermetallic compounds // ACS Omega. – 2021. – V. 6, No. 31. – P. 20254–20263.
97. Holt D.L. Dislocation cell formation in metals // Journal of Applied Physics. – 1970. – V. 41, No. 8. – P. 3197–3201.
98. Kuhlmann-Wilsdorf D., Hansen N. Geometrically necessary, incidental and subgrain boundaries // Scripta Metallurgica et Materialia. – 1991. – V. 25, No. 7. – P. 1557–1562.
99. Bassim M.N., Kuhlmann-Wilsdorf D. Stresses of hexagonal screw dislocation arrays. III. Isolated dislocation cells incorporating hexagonal screw dislocation networks // physica status solidi (a). – 1973. – V. 17, No. 1. – P. 281–292.
100. Bassim M.N., Kuhlmann-Wilsdorf D. Stresses of hexagonal screw dislocation arrays. IV. Cell aggregates // physica status solidi (a). – 1973. – V. 17, No. 2. – P. 379–393.

101. Kuhlmann-Wilsdorf D. The impact of F.R.N. Nabarro on the LEDS theory of work hardening // Progress in Materials Science. – 2009. – V. 54, No. 6. – P. 707–739.
102. Zhang H.W., Huang X., Hansen N. Evolution of microstructural parameters and flow stresses toward limits in nickel deformed to ultra-high strains // Acta Materialia. – 2008. – V. 56, No. 19. – P. 5451–5465.
103. Трусов П.В., Останина Т.В., Швейкин А.И. Эволюция зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: континуальные модели // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2022. – №. 1. – С. 123–155.
104. Трусов П.В., Останина Т.В., Швейкин А.И. Эволюция зеренной структуры металлов и сплавов при интенсивном пластическом деформировании: многоуровневые модели // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2022. – №. 2. – С. 114–146.
105. Kratochvíl J., Orlová A. Instability origin of dislocation substructure // Philosophical Magazine A. – 1990. – V. 61, No. 2. – P. 281–290.
106. Beyerlein I.J., Lebensohn R.A., Tomé C.N. Modeling texture and microstructural evolution in the equal channel angular extrusion process // Materials Science and Engineering: A. – 2003. – V. 345, No. 1. – P. 122–138.
107. Volterra V. Sur l'équilibre des corps élastiques multiplement connexes // Annales scientifiques de l'École Normale Supérieure. – 1907. – V. 24. – P. 401–517.
108. Klimanek P., Klemm V., Romanov A.E., Seefeldt M. Disclinations in plastically deformed metallic materials // Advanced Engineering Materials. – 2001. – V. 3, No. 11. – P. 877–884.

109. Klemm V., Klimanek P., Motylenko M. Transmission electron microscopy analysis of disclination structures in plastically deformed metals // *Materials Science and Engineering: A*. – 2002. – V. 324, No. 1–2. – P. 174–178.
110. Romanov A.E., Kolesnikova A.L. Application of disclination concept to solid structures // *Progress in Materials Science*. – 2009. – V. 54, No. 6. – P. 740–769.
111. Rybin V.V., Zisman A.A., Zolotarevsky N.Yu. Junction disclinations in plastically deformed crystals // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1993. – V. 41, No. 7. – P. 2211–2217.
112. Seefeldt M., Van Houtte P. A disclination-based model for anisotropic substructure development and its impact on the critical resolved shear stresses // *Materials physics and mechanics*. – 2000. – V. 2, No. 2. – P. 133–139.
113. Seefeldt M. Modelling the nucleation and growth of fragment boundary segments in terms of disclinations // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2004. – V. 378, No. 1. – P. 102–106.
114. Seefeldt M. A disclination-based approach for mesoscopic statistical modeling of grain subdivision in niobium // *Computational Materials Science*. – 2013. – V. 76. – P. 12–19.
115. Clayton J.D., McDowell D.L., Bammann D.J. Modeling dislocations and disclinations with finite micropolar elastoplasticity // *International Journal of Plasticity*. – 2006. – V. 22, No. 2. – P. 210–256.
116. Fressengeas C., Taupin V., Capolungo L. An elasto-plastic theory of dislocation and disclination fields // *International Journal of Solids and Structures*. – 2011. – V. 48, No. 25. – P. 3499–3509.
117. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // *Acta Metallurgica*. – 1953. – V. 1, No. 2. – P. 153–162.
118. Kondratev N.S., Trusov P.V. Modeling of subgrain's crystallographic misorientation distribution // *Nanoscience and Technology: An International Journal*. – 2018. – V. 9, No. 4. – P. 283–297.

119. Kondratev N.S., Trusov P. Multilevel models of inelastic deformation: determination of stable low angle boundaries // *Materials Physics and Mechanics*. – 2019. – V. 42. – P. 784–796.
120. Nes E. Modelling of work hardening and stress saturation in FCC metals // *Progress in Materials Science*. – 1997. – V. 41, No. 3. – P. 129–193.
121. Marthinsen K., Nes E. Modelling strain hardening and steady state deformation of Al–Mg alloys // *Materials Science and Technology*. – 2001. – V. 17, No. 4. – P. 376–388.
122. Barnett M.R., Montheillet F. The generation of new high-angle boundaries in aluminium during hot torsion // *Acta Materialia*. – 2002. – V. 50, No. 9. – P. 2285–2296.
123. Ostapovets A., Šedá P., Jäger A., Lejček P. New misorientation scheme for a visco-plastic self-consistent model: Equal channel angular pressing of magnesium single crystals // *International Journal of Plasticity*. – 2012. – V. 29. – P. 1–12.
124. Wu B.L., Wan G., Zhang Y.D., Du X.H., Wagner F., Esling C. Fragmentation of large grains in AZ31 magnesium alloy during ECAE via route A // *Materials Science and Engineering: A*. – 2010. – V. 527, No. 15. – P. 3365–3372.
125. Li D., Zbib H., Sun X., Khaleel M. Predicting plastic flow and irradiation hardening of iron single crystal with mechanism-based continuum dislocation dynamics // *International Journal of Plasticity*. – 2014. – V. 52. – P. 3–17.
126. Askari H., Young J., Field D., Kridli G., Li D., Zbib H. A study of the hot and cold deformation of twin-roll cast magnesium alloy AZ31 // *Philosophical Magazine*. – 2014. – V. 94, No. 4. – P. 381–403.
127. Lyu H., Ruimi A., Zbib H.M. A dislocation-based model for deformation and size effect in multi-phase steels // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 72. – P. 44–59.
128. Toth L.S., Estrin Y., Lapovok R., Gu C. A model of grain fragmentation based on lattice curvature // *Acta Materialia*. – 2010. – V. 58, No. 5. – P. 1782–1794.

129. Devincre B., Kubin L., Hoc T. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations // *Scripta Materialia*. – 2006. – V. 54, No. 5. – P. 741–746.
130. Alankar A., Mastorakos I.N., Field D.P., Zbib H.M. Determination of dislocation interaction strengths using discrete dislocation dynamics of curved dislocations // *Journal of Engineering Materials and Technology*. – 2012. – V. 134, No. 2. – 021018.
131. Svyetlichnyy D.S. Modeling of grain refinement by cellular automata // *Computational Materials Science*. – 2013. – V. 77. – P. 408–416.
132. Svyetlichnyy D.S., Muszka K., Majta J. Three-dimensional frontal cellular automata modeling of the grain refinement during severe plastic deformation of microalloyed steel // *Computational Materials Science*. – 2015. – V. 102. – P. 159–166.
133. Majta J., Madej Ł., Svyetlichnyy D.S., Perzyński K., Kwiecień M., Muszka K. Modeling of the inhomogeneity of grain refinement during combined metal forming process by finite element and cellular automata methods // *Materials Science and Engineering: A*. – 2016. – V. 671. – P. 204–213.
134. Majta J., Perzyński K., Muszka K., Graca P., Madej Ł. Modeling of grain refinement and mechanical response of microalloyed steel wires severely deformed by combined forming process // *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. – 2017. – V. 89, No. 5. – P. 1559–1574.
135. Zehetbauer M., Seumer V. Cold work hardening in stages IV and V of F.C.C. metals–I. Experiments and interpretation // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1993. – V. 41, No. 2. – P. 577–588.
136. Zehetbauer M. Cold work hardening in stages IV and V of F.C.C. metals–II. Model fits and physical results // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1993. – V. 41, No. 2. – P. 589–599.
137. Mecking H., Kocks U.F. Kinetics of flow and strain-hardening // *Acta Metallurgica*. – 1981. – V. 29, No. 11. – P. 1865–1875.

138. Toth L.S. Modelling of strain hardening and microstructural evolution in equal channel angular extrusion // *Computational Materials Science*. – 2005. – V. 32, No. 3–4. – P. 568–576.
139. Estrin Y., Toth L.S., Brechet Y., Kim H.S. Modelling of the evolution of dislocation cell misorientation under severe plastic deformation // *Materials Science Forum*. – 2006. – V. 503–504. – P. 675–680.
140. Estrin Y., Kim H.S. Modelling microstructure evolution toward ultrafine crystallinity produced by severe plastic deformation // *Journal of Materials Science*. – 2007. – V. 42, No. 5. – P. 1512–1516.
141. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Statistically stored, geometrically necessary and grain boundary dislocation densities: microstructural representation and modelling // *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 2007. – V. 463. – P. 2833–2853.
142. Rezvanian O., Zikry M.A., Rajendran A.M. Microstructural modeling in f.c.c. crystalline materials in a unified dislocation-density framework // *Materials Science and Engineering: A*. – 2008. – V. 494, No. 1. – P. 80–85.
143. Toth L.S., Gu C.F. Modeling of disorientation axis distribution in severely deformed copper // *Scripta Materialia*. – 2013. – V. 69, No. 2. – P. 183–186.
144. Ашихмин В.Н., Гитман М.Б., Келлер И.Э., Наймарк О.Б., Столбов В.Ю., Трусов П.В., Фрик П.Г. Введение в математическое моделирование: Учебное пособие / Под ред. П.В. Трусова. – М.: Университетская книга, Логос, 2007. – 440 с.
145. Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. – М: Физматлит, 2001. – 320 с.
146. Romanov K., Shveykin A., Trusov P. Advanced statistical crystal plasticity model: description of copper grain structure refinement during equal channel angular pressing // *Metals*. – 2023. – V. 13, No. 5. – 953.
147. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.В. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М: Наука, 1986. – 232 с.

148. Hutchinson J.W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials // *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences.* – 1976. – V. 348, No. 1652. – P. 101–127.
149. Forest S., Rubin M.B. A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic–plastic transition and no slip indeterminacy // *European Journal of Mechanics A/Solids.* – 2016. – V. 55. – P. 278–288.
150. Швейкин А.И., Вшивкова А.А., Трусов П.В. О способах учета изменяющихся температурно-скоростных условий в многоуровневых конститутивных моделях для описания деформирования металлов (аналитический обзор) // *Физическая мезомеханика.* – 2023. – Т. 26, №. 6. – С. 27–48.
151. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.* – 2004. – V. 193. – P. 5359–5383.
152. Khadyko M., Dumoulin S., Cailletaud G., Hopperstad O. Latent hardening and plastic anisotropy evolution in AA6060 aluminium alloy // *International Journal of Plasticity.* – 2016. – V. 76. – P. 51–74.
153. Швейкин А.И., Трусов П.В., Романов К.А. Некоторые результаты численной оценки устойчивости двухуровневой конститутивной модели ГЦК-поликристалла // *Вычислительная механика сплошных сред.* – 2021. – Т. 14, №. 2. – С. 127–143.
154. Shveykin A., Romanov K., Trusov P. Some issues with statistical crystal plasticity models: description of the effects triggered in FCC crystals by loading with strain-path changes // *Materials.* – 2022. – V. 15, No. 19. – 6586.
155. Shveykin A., Trusov P., Romanov K. Stability of crystal plasticity constitutive models: observations in numerical studies and analytical justification // *Metals.* – 2024. – V. 14, No. 8. – 947.
156. Romanov K.A., Shveykin A.I. Two-level statistical constitutive model with integrated ETMB model: description of grain structure refinement of AISI 304 steel

- in cold bending // Russian Physics Journal. – 2024. – V. 67, No. 10. – P. 1555–1561.
157. 1. “Sigma Technology”. Novel Optimization Strategy – IOSO [Electronic re-source] URL: <https://iosotech.com/> (accessed: 17.09.2025).
158. Швейкин А.И., Трусов П.В., Романов К.А. Об одном подходе к численной оценке устойчивости многоуровневых конститутивных моделей материалов // Вычислительная механика сплошных сред. – 2021. – Т. 14, №. 1. – С. 61–76.
159. Hama T., Kobuki A., Takuda H. Crystal-plasticity finite-element analysis of anisotropic deformation behavior in a commercially pure titanium Grade 1 sheet // International Journal of Plasticity. – 2017. – V. 91. – P. 77–108.
160. Van Houtte P., Li S., Seefeldt M., Delannay L. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model // International Journal of Plasticity. – 2005. – V. 21, No. 3. – P. 589–624.
161. Yi N., Hama T., Kobuki A., Fujimoto H., Takuda H. Anisotropic deformation behavior under various strain paths in commercially pure titanium Grade 1 and Grade 2 sheets // Materials Science and Engineering: A. – 2016. – V. 655. – P. 70–85.
162. Marchenko A., Mazière M., Forest S., Strudel J.-L. Crystal plasticity simulation of strain aging phenomena in α -titanium at room temperature // International Journal of Plasticity. – 2016. – V. 85. – P. 1–33.
163. Kim J.-Y., Rokhlin S.I. Determination of elastic constants of generally anisotropic inclined lamellar structure using line-focus acoustic microscopy // The Journal of the Acoustical Society of America. – 2009. – V. 126, No. 6. – P. 2998–3007.
164. Motyka M., Ziaja W., Sieniawsk J. Titanium alloys – novel aspects of their manufacturing and processing. – Rzeszow: IntechOpen, 2019. – 154 p.
165. Wang J., Zecevic M., Knezevic M., Beyerlein I.J. Polycrystal plasticity modeling for load reversals in commercially pure titanium // International Journal of Plasticity. – 2020. – V. 125. – P. 294–313.

166. Bergé P., Pomeau Y., Vidal C. Order within chaos: towards a deterministic approach to turbulence. – New York: Wiley, 1986. – 329 p.
167. Khalil H.K. Nonlinear Systems. – New Jersey: Prentice Hall, 2002. – 750 p.
168. Васин Р.А. Свойства функционалов пластичности у металлов, определяемые в экспериментах на двузвенных траекториях деформации // Упругость и неупругость. – 1987. – С. 115–127.
169. Аннин Б.Д., Жигалкин В.М. Поведение материалов в условиях сложного нагружения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999. – 342 с.
170. Esche S.K., Ahmetoglu M.A., Kinzel G.L., Altan T. Numerical and experimental investigation of redrawing of sheet metals // Journal of Materials Processing Technology. – 2000. – V. 98, No. 1. – P. 17–24.
171. Trusov P.V., Volegov P.S., Yanz A.Yu. Two-level models of polycrystalline elastoviscoplasticity: Complex loading under large deformations // ZAMM – Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik. – 2015. – V. 95, No. 10. – P. 1067–1080.
172. Truesdell C. A first course in rational continuum mechanics. – San Diego: Academic Press, 1992. – 417 p.
173. Ильюшин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. – М: АН СССР, 1963. – 272 с.
174. Sang H., Lloyd D.J. The influence of biaxial prestrain on the tensile properties of three aluminum alloys // Metallurgical Transactions A. – 1979. – V. 10, No. 11. – P. 1773–1776.
175. Bate P.S. The effects of combined strain-path and strain-rate changes in aluminum // Metallurgical and Materials Transactions A. – 1993. – V. 24, No. 12. – P. 2679–2689.
176. Barlat F., Ferreira Duarte J.M., Gracio J.J., Lopes A.B., Rauch E.F. Plastic flow for non-monotonic loading conditions of an aluminum alloy sheet sample // International Journal of Plasticity. – 2003. – V. 19, No. 8. – P. 1215–1244.

177. Beyerlein I.J., Alexander D.J., Tomé C.N. Plastic anisotropy in aluminum and copper pre-strained by equal channel angular extrusion // *Journal of Materials Science*. – 2007. – V. 42, No. 5. – P. 1733–1750.
178. Beyerlein I.J., Tomé C.N. Modeling transients in the mechanical response of copper due to strain path changes // *International Journal of Plasticity*. – 2007. – V. 23, No. 4. – P. 640–664.
179. Boers S.H.A., Schreurs P.J.G., Geers M.G.D., Levkovitch V., Wang J., Svendsen B. Experimental characterization and model identification of directional hardening effects in metals for complex strain path changes // *International Journal of Solids and Structures*. – 2010. – V. 47, No. 10. – P. 1361–1374.
180. Wejdemann C., Poulsen H.F., Lienert U., Pantleon W. In situ observation of the dislocation structure evolution during a strain path change in copper // *JOM*. – 2013. – V. 65, No. 1. – P. 35–43.
181. Holmedal B., Houtte P.V., An Y. A crystal plasticity model for strain-path changes in metals // *International Journal of Plasticity*. – 2008. – V. 24, No. 8. – P. 1360–1379.
182. Clausmeyer T., Bargmann S., Svendsen B. Modeling of anisotropy induced by evolution of dislocation microstructures on different scales // *AIP Conference Proceedings*. – 2011. – V. 1353, No. 1. – P. 121–126.
183. Mánik T., Holmedal B., Hopperstad O.S. Strain-path change induced transients in flow stress, work hardening and r-values in aluminum // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 69. – P. 1–20.
184. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals // *Philosophical Transactions of the Royal Society: A Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 1992. – V. 341, No. 1662. – P. 443–477.
185. Sharma R., Sargeant D., Daroju S., Knezevic M., Miles M.P., Fullwood D.T. Multi-strain path deformation behavior of AA6016-T4: Experiments and crystal plasticity modeling // *International Journal of Solids and Structures*. – 2022. – V. 244–245. – P. 111536.

186. Wroński M., Kumar M.A., McCabe R., Wierzbowski K., Tomé C. Deformation behavior of CP-titanium under strain path changes: Experiment and crystal plasticity modeling // *International Journal of Plasticity*. – 2022. – V. 148. – 103129.
187. Zhang H., Diehl M., Roters F., Raabe D. A virtual laboratory using high resolution crystal plasticity simulations to determine the initial yield surface for sheet metal forming operations // *International Journal of Plasticity*. – 2016. – V. 80. – P. 111–138.
188. Demir E., Gutierrez-Urrutia I. Investigation of strain hardening near grain boundaries of an aluminum oligocrystal: Experiments and crystal based finite element method // *International Journal of Plasticity*. – 2021. – V. 136. – 102898.
189. Qin J., Holmedal B., Zhang K., Hopperstad O.S. Modeling strain-path changes in aluminum and steel // *International Journal of Solids and Structures*. – 2017. – V. 117. – P. 123–136.
190. Zhang K., Holmedal B., Hopperstad O.S., Dumoulin S., Gawad J., Van Bael A., Van Houtte P. Multi-level modelling of mechanical anisotropy of commercial pure aluminium plate: Crystal plasticity models, advanced yield functions and parameter identification // *International Journal of Plasticity*. – 2015. – V. 66. – P. 3–30.
191. Schmitt J.H., Shen E.L., Raphanel J.L. A parameter for measuring the magnitude of a change of strain path: Validation and comparison with experiments on low carbon steel // *International Journal of Plasticity*. – 1994. – V. 10, No. 5. – P. 535–551.
192. Viatkina E.M., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Numerical analysis of strain path dependency in FCC metals // *Computational Mechanics*. – 2008. – V. 41, No. 3. – P. 391–405.
193. Vinogradov A., Estrin Y. Analytical and numerical approaches to modelling severe plastic deformation // *Progress in Materials Science*. – 2018. – V. 95. – P. 172–242.

194. Oudriss A., Feaugas X. Length scales and scaling laws for dislocation cells developed during monotonic deformation of (001) nickel single crystal // International Journal of Plasticity. – 2016. – V. 78. – P. 187–202.
195. Bailey J.E., Hirsch P.B. The dislocation distribution, flow stress, and stored energy in cold-worked polycrystalline silver // The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics. – 1960. – V. 5, No. 53. – P. 485–497.
196. Ohashi T., Kawamukai M., Zbib H. A multiscale approach for modeling scale-dependent yield stress in polycrystalline metals // International Journal of Plasticity. – 2007. – V. 23, No. 5. – P. 897–914.
197. Takeuchi S., Argon A.S. Steady-state creep of alloys due to viscous motion of dislocations // Acta Metallurgica. – 1976. – V. 24, No. 10. – P. 883–889.
198. Bakó B., Groma I., Gyorgyi G., Zimanyi G. Dislocation patterning: the role of climb in meso-scale simulations // Computational Materials Science. – 2006. – V. 38, No. 1. – P. 22–28.
199. Staker M.R., Holt D.L. The dislocation cell size and dislocation density in copper deformed at temperatures between 25 and 700°C // Acta Metallurgica. – 1972. – V. 20, No. 4. – P. 569–579.
200. Koneva N.A., Starenchenko V.A., Lychagin D.V., Trishkina L.I., Popova N.A., Kozlov E.V. Formation of dislocation cell substructure in face-centred cubic metallic solid solutions // Materials Science and Engineering: A. – 2008. – V. 483–484. – P. 179–183.
201. Parvin H., Kazeminezhad M. Development a dislocation density based model considering the effect of stacking fault energy: Severe plastic deformation // Computational Materials Science. – 2014. – V. 95. – P. 250–255.
202. Hosseini E., Kazeminezhad M. ETMB model investigation of flow softening during severe plastic deformation // Computational Materials Science. – 2009. – V. 46, No. 4. – P. 902–905.

203. Hosford W.F. Mechanical behavior of materials. Second edition. – New York: Cambridge University Press, 2010. – 419 p.
204. An X.H., Han W.Z., Huang C.X., Zhang P., Yang G., Wu S.D., Zhang Z.F. High strength and utilizable ductility of bulk ultrafine-grained Cu–Al alloys // *Applied Physics Letters*. – 2008. – V. 92, No. 20. – 201915.
205. Hegedűs Z., Gubicza J., Kawasaki M., Chinh N.Q., Suvegh K., Fogarassy Z., Langdon T.G. High temperature thermal stability of ultrafine-grained silver processed by equal-channel angular pressing // *Journal of Materials Science*. – 2013. – V. 48, No. 4. – P. 1675–1684.
206. Bonneville J., Escaig B. Cross-slipping process and the stress-orientation dependence in pure copper // *Acta Metallurgica*. – 1979. – V. 27, No. 9. – P. 1477–1486.
207. Huang M., Rivera-Díaz-del-Castillo P.E.J., Bouaziz O., der Zwaag S. A constitutive model for high strain rate deformation in FCC metals based on irreversible thermodynamics // *Mechanics of Materials*. – 2009. – V. 41, No. 9. – P. 982–988.
208. Mohamed F.A. A dislocation model for the minimum grain size obtainable by milling // *Acta Materialia*. – 2003. – V. 51, No. 14. – P. 4107–4119.
209. Lapovok R., Dalla Torre F.H., Sandlin J., Davies C.H.J., Pereloma E.V., Thomson P.F., Estrin Y. Gradient plasticity constitutive model reflecting the ultrafine micro-structure scale: the case of severely deformed copper // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2005. – V. 53, No. 4. – P. 729–747.
210. Rezaee-Bazzaz A., Ahmadian S., Reihani H. Modeling of microstructure and mechanical behavior of ultra fine grained aluminum produced by accumulative roll-bonding // *Materials and Design*. – 2011. – V. 32, No. 8. – P. 4580–4585.
211. Baik S.C., Hellmig R.J., Estrin Y., Kim H.S. Modeling of deformation behavior of copper under equal channel angular pressing // *International Journal of Materials Research*. – 2003. – V. 94, No. 6. – P. 754–760.

212. Beyerlein I.J., Tóth L.S. Texture evolution in equal-channel angular extrusion // *Progress in Materials Science*. – 2009. – V. 54, No. 4. – P. 427–510.
213. Alawadhi M.Y., Sabbaghianrad S., Huang Y., Langdon T.G. Evaluating the paradox of strength and ductility in ultrafine-grained oxygen-free copper processed by ECAP at room temperature // *Materials Science and Engineering: A*. – 2021. – V. 802. – 140546.
214. Harder J. FEM-simulation of the hardening behavior of FCC single crystals // *Acta Mechanica*. – 2001. – V. 150, No. 3–4. – P. 197–217.
215. Liu F., Yuan H., Yin J., Wang J.T. Influence of stacking fault energy and temperature on microstructures and mechanical properties of fcc pure metals processed by equal-channel angular pressing // *Materials Science and Engineering: A*. – 2016. – V. 662. – P. 578–587.
216. Dalla Torre F., Lapovok R., Sandlin J., Thomson P.F., Davies C.H.J., Pereloma E.V. Microstructures and properties of copper processed by equal channel angular extrusion for 1–16 passes // *Acta Materialia*. – 2004. – V. 52, No. 16. – P. 4819–4832.
217. Tikhonova M., Belyakov A., Kaibyshev R. Strain-induced grain evolution in an austenitic stainless steel under warm multiple forging // *Materials Science and Engineering: A*. – 2013. – V. 564. – P. 413–422.
218. Odnobokova M., Belyakov A., Enikeev N., Kaibyshev R., Valiev R.Z. Microstructural changes and strengthening of austenitic stainless steels during rolling at 473 K // *Metals*. – 2020. – V. 10, No. 12. – 1614.
219. Mercuri A., Fanelli P., Giorgetti F., Rubino G., Stefanini C. Experimental and numerical analysis of roll bending process of thick metal sheets // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2021. – V. 1038, No. 1. – 012067.
220. Gandhi A.H., Raval H.K. Analytical modeling of top roller position for multiple pass (3-Roller) cylindrical forming of plates // *American Society of Mechanical Engineers Digital Collection*, 2007. – P. 107–116.

221. El-Bahloul S.A., El-Shourbagy H.E., El-Bahloul A.M., El-Midany T.T. Experimental and thermo-mechanical modeling optimization of thermal friction drilling for AISI 304 stainless steel // CIRP Journal of Manufacturing Science and Technology. – 2018. – V. 20. – P. 84–92.
222. Mohta K., Gupta S.K., Cathirvolu S., Jaganathan S., Chattopadhyay J. High temperature deformation behavior of Indian PHWR Calandria material SS 304L // Nuclear Engineering and Design. – 2020. – V. 368. – 110801.
223. Odnobokova M., Belyakov A., Kaibyshev R. Development of nanocrystalline 304L stainless steel by large strain cold working // Metals. – 2015. – V. 5, No. 2. – P. 656–668.
224. Odnobokova M., Belyakov A., Kaibyshev R. Grain refinement and strengthening of austenitic stainless steels during large strain cold rolling // Philosophical Magazine. – 2019. – V. 99, No. 5. – P. 531–556.
225. Романов К.А., Швейкин А.И. Многоуровневая статистическая конститутивная модель на базе континуальной дислокационной динамики и ее применение для комплексного описания трансформации структуры меди при равноканальном угловом прессовании // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2025. – №. 4. – С. 5–23.
226. Hall E.O. The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results // Proceedings of the Physical Society. Section B. – 1951. – V. 64, No. 9. – P. 747–753.
227. Petch N.J. The cleavage strength of polycrystals // Journal of the Iron and Steel Institute. – 1953. – V. 174. – P. 25–28.
228. Cordero Z.C., Knight B.E., Schuh C.A. Six decades of the Hall–Petch effect – a survey of grain-size strengthening studies on pure metals // International Materials Reviews. – 2016. – V. 61, No. 8. – P. 495–512.

229. Motaman S.A.H., Prah U. Microstructural constitutive model for polycrystal viscoplasticity in cold and warm regimes based on continuum dislocation dynamics // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 2019. – V. 122. – P. 205–243.
230. Kitayama K., Tomé C.N., Rauch E.F., Gracio J.J., Barlat F. A crystallographic dislocation model for describing hardening of polycrystals during strain path changes. Application to low carbon steels // *International Journal of Plasticity*. – 2013. – V. 46. – P. 54–69.
231. Shizawa K., Zbib H.M. A thermodynamical theory of gradient elastoplasticity with dislocation density tensor. I: Fundamentals // *International Journal of Plasticity*. – 1999. – V. 15, No. 9. – P. 899–938.
232. Burgers J.M. Geometrical considerations concerning the structural irregularities to be assumed in a crystal // *Proceedings of the Physical Society*. – 1940. – V. 52, No. 1. – P. 23–33.
233. Gourdet S., Montheillet F. A model of continuous dynamic recrystallization // *Acta Materialia*. – 2003. – V. 51, No. 9. – P. 2685–2699.
234. Sun Z.C., Wu H.L., Cao J., Yin Z.K. Modeling of continuous dynamic recrystallization of Al-Zn-Cu-Mg alloy during hot deformation based on the internal-state-variable (ISV) method // *International Journal of Plasticity*. – 2018. – V. 106. – P. 73–87.
235. Lugo N., Llorca N., Suñol J.J., Cabrera J.M. Thermal stability of ultrafine grains size of pure copper obtained by equal-channel angular pressing // *Journal of Materials Science*. – 2010. – V. 45, No. 9. – P. 2264–2273.
236. Prangnell P.B., Bowen J.R., Apps P.J. Ultra-fine grain structures in aluminium alloys by severe deformation processing // *Materials Science and Engineering: A*. – 2004. – V. 375–377. – P. 178–185.
237. Hatledal L.I., Chu Y., Styve A., Zhang H. Vico: An entity-component-system based co-simulation framework // *Simulation Modelling Practice and Theory*. – 2021. – V. 108. – 102243.

Приложение

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО
о государственной регистрации программы для ЭВМ
№ 2024668653

Программная реализация модели ЕТМВ: модуль для описания измельчения зерен в двухуровневой статистической конститутивной модели

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (ПНИПУ) (RU)*

Авторы: *Романов Кирилл Андреевич (RU), Швейкин Алексей Игоревич (RU), Трусов Петр Валентинович (RU)*

Заявка № **2024668403**
Дата поступления **09 августа 2024 г.**
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ **09 августа 2024 г.**



Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности
Ю.С. Зубов

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО
о государственной регистрации программы для ЭВМ
№ 2024691996

Реализация многоуровневых конститутивных моделей материалов: интеграционный модуль для статистических моделей

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (ПНИПУ) (RU)*

Авторы: *Романов Кирилл Андреевич (RU), Кондратьев Никита Сергеевич (RU), Швейкин Алексей Игоревич (RU), Трусов Петр Валентинович (RU)*

Заявка № **2024691962**
Дата поступления **25 декабря 2024 г.**
Дата государственной регистрации
в Реестре программ для ЭВМ **25 декабря 2024 г.**



Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности
Ю.С. Зубов