

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

На правах рукописи



Остапович Кирилл Вадимович

**Проектирование рационально текстурированных
поликристаллических изделий на основе
двухуровневой статистической модели
упруговязкопластического деформирования**

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф.
Трусов Петр Валентинович

Пермь – 2023

Оглавление

Сокращения	3
Введение	4
1. Формулировка задачи функционально-ориентированного проектирования текстурированных поликристаллических изделий	12
1.1. Предварительные определения	15
1.2. Связанные оптимизационные подзадачи для стадий функционирования изделия и деформационной обработки заготовки	22
2. Моделирование процессов обработки поликристаллических заготовок методами интенсивной пластической деформации с описанием текстурообразования	26
2.1. Концептуальная постановка	34
2.2. Математическая постановка	35
2.3. Конечно-элементная реализация контактных условий	48
2.4. Статистическая реализация начальных условий	63
3. Построение пространства текстурных параметров	82
3.1. Редуцированное представление поля меры распределения ориентаций	85
3.2. Идентификация текстурных компонент	88
3.3. Оценка значимости текстурных параметров	95
4. Решение задачи функционально-ориентированного проектирования	99
4.1. Основная процедура	99
4.2. Демонстрационный пример	101
Заключение	106
Литература	108
Приложение	123

Сокращения

ВСТП – вектор-строка текстурных параметров.

ВСУП – вектор-строка управляющих параметров.

ВЭМО – взвешенная эмпирическая мера распределения ориентаций.

ДСК – деформируемая система координат.

ЗФОП – задача функционально-ориентированного проектирования.

ИПД – интенсивное пластическое деформирование.

КСК – кристаллографическая система координат.

ЛСК – лабораторная система координат.

МДТТ – механика деформируемого твердого тела.

МКЭ – метод конечных элементов.

МО – мера распределения ориентаций.

ОПП – обратная полюсная плотность.

ОПФ – обратная полюсная фигура.

ППП – прямая полюсная плотность.

ППФ – прямая полюсная фигура.

ПСК – (жесткая) подвижная система координат.

СВСП – случайная весовая селекция с повторениями.

СЛАУ – система линейных алгебраических уравнений.

ФРО – функция распределения ориентаций.

ЭМО – эмпирическая мера распределения ориентаций.

Т-подзадача – оптимизационная задача достижения требуемой текстуры в изделии за счет подбора режима деформирования заготовки в технологическом процессе.

Ф-подзадача – оптимизационная задача достижения требуемого функционирования изделия за счет подбора его текстуры.

Введение

Актуальность и степень разработанности темы исследования.

Повышение требований к эксплуатационным качествам современных деталей и конструкций обуславливает интерес к проблемам проектирования изделий, наилучшим образом адаптированных под конкретные условия функционирования. Многочисленные теоретические и экспериментальные исследования показывают, что свойства материалов определяются их строением на нижележащих масштабных уровнях. В этой связи возникают задачи создания в изготавливаемом изделии внутренней структуры, обеспечивающей для него оптимальные рабочие характеристики.

Многие физико-механические свойства поликристаллических металлов и сплавов в значительной степени зависят от кристаллографической текстуры – неоднородностей распределения ориентаций решеток составляющих их кристаллитов. В таких материалах появление текстуры может приводить к возникновению макроскопической анизотропии, согласованность которой с конкретными воздействиями, предусмотренными эксплуатацией проектируемых изделий, определяет качество их функционирования. Некоторые примеры подобного влияния на упругие, пластические, термические и магнитные характеристики приведены в статьях Acar, Acharjee, Sundararaghavan, Kalidindi, Kuramae, Zabaras и др. [48-50, 74-75, 88, 89, 150-153], а также публикациях автора [20, 158, 160]. В области изучения анизотропии, в особенности – упругой симметрии, можно отметить работы Cowin, Danek, Gazis, Norris, Sevostianov, Slawinski, Аннина, Ашкенази, Жилина, Маркина, Митюшова, Остросаблина, Победря, Рыхлевского, Христича, Цвелодуба, Черных и др. [1, 2, 4, 12, 18, 22, 27, 32, 41-44, 65, 67-69, 76, 91, 115, 120, 146].

Возникновение текстуры сопровождается многие технологические процессы формирования и обработки изделий, основанные на интенсивном пластическом деформировании (ИПД; сюда можно отнести равноканальное угловое прессование, волочение, прокатку, штамповку и другие). Рациональный подбор

режимов в таких операциях дает возможность повысить качество функционирования создаваемых продуктов за счет текстурирования, обеспечивающего требуемые физико-механические свойства.

Физически обоснованный подход к решению проблем обозначенного класса предполагает моделирование поведения материалов как иерархически упорядоченных систем. Особую важность при этом имеет адекватное описание деформационного текстурообразования в условиях сложного нагружения. В последние десятилетия в данной области активно применяется многоуровневый подход на базе физических теорий упруговязкопластичности. Подобные модели описывают состояние деформируемого материала на требуемых структурно-масштабных уровнях в терминах так называемых внутренних переменных. Изменение их значений устанавливается с использованием соответствующих эволюционных соотношений, как правило, имеющих структуру систем алгебраических и обыкновенных дифференциальных уравнений. В отличие от известных макрофеноменологических теорий, такой подход позволяет включить в рассмотрение различные дефекты кристаллического строения, в частности – краевые дислокации, которые являются носителями ключевых механизмов неупругой деформации. основополагающие работы в указанном направлении представлены публикациями Bishop, Hill, Masimo, Sachs, Taylor и др. [59, 60, 105, 142, 156]. Значительный вклад в их развитие был внесен зарубежными исследователями, например, в статьях Anand, Asaro, Bronkhorst, Nabraken, Horstemeyer, Kalidindi, Luscher, McDowell, Roters, Van Houtte и др. [52, 61, 78, 88, 89, 103, 104, 111-113, 162-164]. Среди отечественных можно выделить работы Балахонова, Волкова, Кривилева, Лихачев, Макарова, Малинина, Панина, Романовой, Рыбина, Трусова и др. [3, 16, 17, 23-26, 31 38, 39].

В обозначенном контексте рационального проектирования нередко употребляется термин «функциональные материалы». Обычно при этом подразумеваются материалы с адаптированными свойствами, обеспечивающими требуемый отклик на заданные воздействия. Следует обратить внимание, что подобные требования не могут быть сформулированы безотносительно условий

эксплуатации детали или конструкции в целом. В этом смысле представляется более корректным говорить о «функциональных материалах-изделиях». Процедуры их проектирования целесообразно реализовывать поэтапно: от определения внутренней структуры изделия, оптимальной для конкретных условий эксплуатации изделия, до подбора наилучших параметров заготовки и режимов обработки, направленных на ее формирование. Для исследуемого в работе класса проблем в роли ключевой характеристики такой структуры выступает текстура, в широком смысле связываемая с распределением положения кристаллитов не только в ориентационном, но также и физическом пространстве (другими словами, в различных материальных областях могут иметь место отличающиеся распределения ориентаций). В общем случае каждый этап проектирования предполагает рассмотрение обратной контактной начально-краевой задачи с использованием в качестве определяющих соотношений поликристаллического материала многоуровневой (конститутивной) модели. В настоящее время аппарат решения подобных задач развит недостаточно; некоторые наработки в этой области представлены в исследовательских и обзорных публикациях Acharjee, Adams, Ganapathysubramanian, Houskamp, Kalidindi, Kuramae, McDowell, Nakamachi, Olson, Proust, Sundararaghavan, Zabaras и др. [49, 50, 74, 75, 88, 89, 96, 113, 117]. Необходимо отметить, что для комплексных постановок, имеющих практическую значимость и претендующих на физическую адекватность, доведение до вычислительных реализаций существующих алгоритмов оказывается затруднительным. Таким образом, разработка и совершенствование подходов в данном направлении являются актуальными проблемами.

Вообще говоря, расчеты даже прямых задач, описывающих реальные процессы ИПД, обладают высокой ресурсоемкостью. Данное обстоятельство обуславливает интерес к так называемым статистическим формулировкам рассматриваемых конститутивных моделей (как наименее затратным в вычислительном плане среди альтернативных постановок). При их использовании материальным точкам (представительным объемам) деформируемого тела на

макроуровне в соответствие ставятся агрегаты из статистически достаточного числа кристаллитов – элементов мезоуровня. Состояние и свойства отдельно взятого кристаллита принимаются однородными и определяются с использованием физически-ориентированной подмодели в зависимости от передаваемых в нее параметров воздействия (градиента скорости деформирования и возможных других). Характеристики отклика (напряжения, упругие модули, вязкопластические деформации, спин в определении коротационной производной и возможные другие) в каждой точке вычисляются осреднением своих мезоскопических аналогов по соответствующему поликристаллическому агрегату.

В диссертации формулируется следующая так называемая, для краткости, задача функционально-ориентированного проектирования (ЗФОП). Требуется установить режимы деформирования поликристаллической заготовки, реализующие в готовом изделии текстуру, рациональную с позиции его дальнейшего функционирования. Целью работы является создание на базе статистической двухуровневой конститутивной модели упруговязкопластического деформирования поликристалла вычислительно эффективного подхода к решению ЗФОП.

Основные задачи:

1. Математическая постановка ЗФОП (в виде связанных оптимизационных подзадач, отвечающих стадиям функционирования проектируемого изделия и его изготовления пластическим деформированием заготовки) с формализованными целевыми критериями и ограничениями.
2. Математическая постановка геометрически нелинейной контактной начально-краевой задачи (на основе статистической двухуровневой конститутивной модели поликристалла), описывающей квазистатические процессы ИПД заготовки с учетом текстурообразования.
3. Разработка алгоритмов для корректного задания в численных расчетах контактных краевых (для скоростной формы уравнения равновесия) и начальных (при наличии предварительной текстуры) условий.

4. Формулировка способа редуцированного представления текстур (с использованием методов кластерного анализа) для определения вычислительно эффективных целевых критериев и ограничений в ЗФОП.
5. Построение последовательности решения ЗФОП и ее реализация на конкретном примере.

Методология и методы исследования. Работа опирается на аппарат математического моделирования, нелинейные механику и физику деформируемого твердого тела, многоуровневый подход к построению определяющих соотношений с введением внутренних переменных, численные методы, теории оптимизации, вероятностей и математической статистики с привлечением элементов функционального анализа и теории групп. Решение начально-краевых задач упруговязкопластического деформирования осуществлялось в рамках метода конечных элементов (МКЭ) в формулировке Галеркина. Обыкновенные дифференциальные уравнения, входящие в конститутивные модели указанных задач, интегрировались по схеме Эйлера. Применяемый для генерации распределений ориентаций кристаллических решеток по заданным полюсным фигурам алгоритм разработан на базе подхода Монте-Карло. Для редуцированного представления текстур использовался специально созданный алгоритм кластеризации в ориентационном пространстве, опирающийся на поиск связанных компонент в неориентированном графе и модифицированный в работе медоидный метод. Возникающие различного рода оптимизационные задачи решались с использованием комбинированных квазиградиентных, стохастических методов и некоторых эвристических приемов.

Научная новизна:

1. Впервые в общем виде сформулирована ЗФОП и предложен оригинальный метод ее решения, основанный на рассмотрении связанных оптимизационных подзадач, отвечающих стадиям деформационной обработки заготовки и функционирования готового изделия.

2. Предложен новый алгоритм реализации контактных условий в скоростной квазистатической конечно-элементной формулировке начально-краевой задачи деформирования твердого тела.
3. Предложен новый алгоритм типа Монте-Карло генерации выборок ориентаций кристаллических решеток, распределенных в соответствии с заданными полюсными фигурами.
4. Разработан новый метод идентификации текстурных компонент на основе послойной симметрично-инвариантной кластеризации взвешенных выборок ориентаций кристаллических решеток.
5. Разработан оригинальный метод адаптивного построения пространства текстурных параметров с оценкой их значимости для ЗФОП.
6. Получены результаты, демонстрирующие использование элементов созданного аппарата, в том числе простой пример реализации всех стадий решения ЗФОП.

Теоретическую значимость работы составляют следующие предложенные в ней подходы:

1. Задание контактных условий для начально-краевой задачи деформирования твердого тела в скоростной конечно-элементной формулировке, производимое посредством перехода к соответствующим смешанным условиям, согласованным с исходными по узловым силам.
2. Редуцированное представление текстуры в поликристаллическом агрегате на основе методов кластерного анализа.
3. Восстановление в дискретной форме меры распределения ориентаций кристаллических решеток по заданным или всюду вычислимым полюсным плотностям с использованием подхода Монте-Карло в рамках статистической интерпретации фундаментального уравнения текстурного анализа.

Практическая значимость работы заключается в применимости указанных подходов для физически обоснованного моделирования технологических процессов ИПД поликристаллических металлов и сплавов, в том числе – при решении проблем типа ЗФОП, а также анализа получаемых в расчетах текстур.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая постановка и метод решения ЗФОП.
2. Алгоритм реализации контактных условий в скоростной квазистатической конечно-элементной формулировке начально-краевой задачи деформирования твердого тела.
3. Алгоритм типа Монте-Карло генерации выборок ориентаций кристаллических решеток, распределенных в соответствии с заданными полюсными фигурами.
4. Метод идентификации текстурных компонент на основе послойной симметрично-инвариантной кластеризации взвешенных выборок ориентаций кристаллических решеток.
5. Метод адаптивного построения пространства текстурных параметров с оценкой их значимости для ЗФОП.

Достоверность и обоснованность результатов проведенных исследований подтверждается удовлетворительным соответствием численных решений тестовых задач экспериментальным данным.

Апробация работы. Полученные результаты были представлены в докладах автора на конференциях различного уровня: Конгресс «Всероссийский съезд по теоретической и прикладной механике» (Санкт-Петербург: 2023); Всероссийские конференции «Зимняя школа по механике сплошных сред» (Пермь: 2017, 2019, 2021, 2023); Международная конференция «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск: 2020); Всероссийские школы-конференции молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь: 2016–2020); Международная конференция «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург: 2018); Международная конференция с элементами научной школы для молодежи «Современные технологии и материалы новых поколений» (Томск: 2017); Международный симпозиум «Неравновесные процессы в сплошных средах» (Пермь: 2017). Полностью диссертационная работа обсуждалась на семинарах

кафедры «Математическое моделирование систем и процессов» (руководитель – зав. каф., д.ф.-м.н., проф. П.В. Трусков) Пермского национального исследовательского политехнического университета (ПНИПУ), кафедры «Механика композиционных материалов и конструкций» ПНИПУ (руководитель – и.о. зав. каф., к.т.н. П.В. Писарев), Института механики сплошных сред УрО РАН (руководитель – академик РАН, проф. В.П. Матвеев).

Публикации по теме диссертации включают 31 работу, среди которых: 6 статей [19-21, 123, 125, 159] в журналах из перечня изданий, рецензируемых ВАК; 11 публикаций [20, 21, 121-126, 158-160] в изданиях, входящих в международные реферативные базы данных из списка: Chemical Abstracts, MathSciNet, Scopus, Springer, Web of Science, zbMATH; 2 свидетельства [36, 37] о государственной регистрации программы для ЭВМ (копии документов – в приложении).

Личный вклад автора. Обзор литературы по теме диссертационного исследования и связанными с ней вопросами выполнен лично автором. Постановка представленных в работе задач осуществлена автором совместно с научным руководителем. Алгоритмы решения поставленных задач и реализующие их программы разработаны лично автором. Расчеты с использованием разработанных программных средств и анализ полученных в них результатов проведены лично автором. Опубликованные статьи по теме диссертационного исследования подготовлены автором совместно с научным руководителем.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из списка сокращений, введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы (169 наименований) и приложения; содержит 123 страницы текста, 20 рисунков, 4 таблицы.

1. Формулировка задачи функционально-ориентированного проектирования текстурированных поликристаллических изделий

Equation Chapter 1 Section 1

Обозначенная ЗФОП, занимающая центральное место в настоящей диссертации, отсылает к вычислительному конструированию функционального поликристаллического материала-изделия, т.е. тела с требуемыми эксплуатационными характеристиками. Подобную проблему следует рассматривать как обратную задачу [24, 26]. Ее постановка предполагает описание взаимосвязи между внутренним строением материала и результирующими эффективными характеристиками, а потому не представляется принципиально возможной без привлечения контекста механики структурно-неоднородных сред. Перспективным подходом в указанной области, взятым на вооружение в данной работе, является многоуровневое моделирование на базе физических теорий [39]. Построению методологии проектирования функциональных материалов-изделий в рамках такого рода моделей посвящена работа McDowell и Olson [113]. Отмечается междисциплинарность и многостадийность используемых в ней подходов, описываются характерные трудности, возникающие при решении задач обозначенного класса.

Как правило, требования к качеству функционирования реального изделия предъявляются сразу по множеству показателей. При этом стремление к улучшению одновременно нескольких из них приводит к многокритериальной оптимизационной задаче, в классическом понимании не являющейся корректной. Об ее решении можно говорить только в специальном смысле, подразумевая, например, используемый для регуляризации постановки прием. Так или иначе, критерий и ограничения результирующей задачи в конечном счете оказываются выраженными через требуемые показатели функционирования. При этом, хотя каждый из них и может определяться своим набором физико-механических характеристик, последние, в свою очередь, зависят от внутренней структуры материала изделия. Следует заметить, что для поликристаллических материалов

текстура является далеко не единственным атрибутом такой структуры, влияющим на получаемые эффективные свойства. Однако для рассматриваемого в работе класса проблем ее роль принимается детерминирующей.

Некоторые работы, посвященные развитию аппарата многоуровневого проектирования рационально текстурированных поликристаллических материалов, представлены в публикациях Asar, Acharjee, Adams, Ganapathysubramanian, Houskamp, Kalidindi, Kuramae, Nakamachi, Proust, Sundararaghavan, Zabarar и др. [48-50, 74-75, 88, 96, 133, 150-153]. Приведенные результаты решения ряда задач указывают на возможность практически значимого улучшения различных характеристик, требуемых для конкретных условий эксплуатации изделия, за счет создания в нем специальной текстуры. Следует заметить, что выбор того или иного подхода к рационализации текстуры на практике упирается в способ ее количественного описания. Как правило, при этом рассматриваются некоторые представления распределений ориентаций, подходящим образом редуцируемые в вычислительных приложениях. Под редуцированием здесь и далее понимается аппроксимация, допускающая выражение в терминах конечного (либо меньшего) набора параметров. В данной работе математическое представление текстуры в общем случае дается полем меры (или ее плотности) распределения ориентаций (ПМО, МО) на конфигурации материальной области. Построения, необходимые для строгой формулировки этого определения, приводятся в следующем разделе 1.1 диссертации. В целом, к рассмотрению МО в том или ином виде сводятся практически все приложения, оперирующие с понятием текстуры, включая отмеченные выше работы. Обзор используемых в них приемов (редуцированного) представления МО содержится в главе 3 вместе с указанием некоторых деталей реализации. Непосредственно далее в тексте описываются только конкретные примеры решенных задач, представленные в литературе.

В статье Adams и др. [50] минимизировалась длина гибкой консольной балки при заданном поперечном смещении торца. В качестве ограничений рассматривались минимальная величина восстанавливающей силы и условие

функционирования конструкции в упругой области. Оптимизация проводилась в классе многоосных текстур для ряда материалов с кубической решеткой. Полученные в результате оптимальные текстуры оказались одноосными. В работе Kalidindi и др. [89] с использованием того же аппарата проектирования для пластины с круговым вырезом максимизировалась предельная одноосная нагрузка, не приводящая к возникновению неупругих деформаций. Определены параметры орторомбической текстуры, обеспечивающей такое функционирование. Установленные величины целевого критерия для наихудшего, наилучшего и «бестекстурного» случаев соотносились как 0.67/1.065/1.02. Близость двух последних значений можно трактовать как более ожидаемое завышение оценок качества рассматриваемого функционирования, предоставляемых гипотезой об изотропии материала при условии его реальной анизотропии. Для найденной оптимальной текстуры в последующей публикации Kalidindi и др. [88] описано построение приводящей к ней траектории деформации, воспроизводящей некоторый технологический процесс. Полученной в результате операционной последовательности отвечает двухстадийная прокатка во взаимно-перпендикулярных направлениях с коэффициентами обжатия 0.5 и 0.2.

Основанная на альтернативном аппарате проектирования методика определения градиента скорости деформирования, реализующего требуемые текстуры в представительных объемах поликристаллов, предложена в работе Acharjee и Zabaras [49]. В порядке верификации рассмотрено ее приложение к достижению для ряда кубических материалов заданных эффективных характеристик: энергетических потерь на магнитный гистерезис, распределения по различным направлениям напряжения течения, значения коэффициента Ланкфорда (пластической анизотропии). В статье Ganapathysubramanian и Zabaras [74] приведен пример получения необходимого распределения модуля Юнга для поликристаллической меди. В работах Sundararaghavan и Zabaras построены траектории деформирования, обеспечивающие требуемую зависимость эквивалентного напряжения от времени [153], заданное распределение множителя Тейлора. Некоторые из обозначенных выше задач также рассматривались в

других публикациях авторов [151, 152], посвященных развитию используемого ими аппарата с привлечением методов анализа данных и машинного обучения. В статье Asar и Sundararaghavan [48] описано решение двух проблем поиска текстур, оптимальных с точки зрения заданных целевых критериев. В первом случае максимизировалась температура коробления растягиваемой титановой пластины. Установленная различными способами текстура, отвечающая требуемому функционированию, оказалась унимодальной. Обеспеченный ею прирост критерия по отношению к «бестекстурному» значению составил 23.0%–28.3%. Во втором рассмотренном примере максимизировалось напряжение течения консольной балки из галфенола при ограничениях на собственные изгибные и крутильные частоты колебаний. Найдено несколько качественно различающихся текстур, каждую из которых можно принять в качестве решения задачи.

Оптимизации асимметричной прокатки листов из алюминиевого сплава посвящены статьи Nakamachi, Kuramae и др. [96, 117]. Из предварительных экспериментальных исследований идентифицированы текстуры, обеспечивающие наилучшую формуемость материала при последующий штамповке. В модели процесса подбирались технологические параметры, позволяющие приблизиться к таким текстурам.

1.1. Предварительные определения

В данном разделе вводятся все необходимые обозначения, составляющие основу математического аппарата диссертационной работы. Большая его часть опирается на стандартные определения тензорного [57] и функционального анализа [13, 30], теории меры [30, 40, 45] и групп [6, 7]. Во встречающихся далее выражениях правило о неявном суммировании по парам повторяющихся индексов не принимается. Перечисление в тексте пронумерованных элементов осуществляется в {фигурных скобках}; диапазоны варьирования номеров в этом случае указываются отдельно. С целью более компактной записи ряда

алгебраических выражений, предполагающих проверку некоторого условия (логической переменной) C , в обозначениях используется его индикатор C :

$$C = \begin{cases} 1 : C = \text{ИСТИНА}; \\ 0 : C = \text{ЛОЖЬ}. \end{cases}$$

Через $\text{int } \mathcal{S}$, $\text{cl } \mathcal{S}$ и $\partial \mathcal{S} = \text{int } \mathcal{S} \setminus \text{cl } \mathcal{S}$ записываются внутренность, замыкание и граница множества \mathcal{S} в произвольном топологическом пространстве.

Рассматриваются множества следующих чисел: \mathbb{Z}^+ – натуральных; $|\mathbb{Z}|$ – целых неотрицательных; \mathbb{R} – действительных; $|\mathbb{R}|$ – неотрицательных действительных; \mathbb{R}^+ – положительных действительных. Декартово N -кратное произведение « \times » множества \mathcal{X} , где $N \in \mathbb{Z}^+$, обозначается \mathcal{X}^N . В зависимости от контекста, произвольный элемент $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^N$ также называется вектор-строкой (размерности N), а транспонированный к нему $\mathbf{r}^T \in (\mathbb{R}^N)^T = \mathbb{R}_N$ – вектор-столбцом. Множество матриц размерности $M \times N$, где $M, N \in \mathbb{Z}^+$, записывается как \mathbb{R}_M^N . Символ матричного умножения всюду опускается.

Через \mathbb{E}_3 обозначается трехмерное (евклидово) пространство над \mathbb{R} со скалярным произведением « \cdot ». Вводится гильбертова (или евклидова) норма $\|\cdot\|: \mathbb{E}_3 \rightarrow |\mathbb{R}|$ ($\mathbf{e} \in \mathbb{E}_3$):

$$\|\mathbf{e}\| = \sqrt{\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}};$$

и определяемая ей единичная сфера $\mathcal{U} \subset \mathbb{E}_3$:

$$\mathcal{U} = \{ \mathbf{u} \mid \mathbf{u} \in \mathbb{E}_3, \|\mathbf{u}\| = 1 \},$$

векторы которой используются в том числе для указания направлений.

На \mathbb{E}_3 задается система \mathcal{E} подмножеств, принимаемых в качестве возможных конфигураций (или геометрических мест точек) формализованного понятия тела в механике сплошной среды [35, 157]. Следует заметить, что в приложениях обычно каждое такое множество $\mathcal{K} \in \mathcal{E}$ полагается канонически (или регулярно) либо замкнутым [35]: $\text{clint } \mathcal{K} = \mathcal{K}$, либо открытым [119, 157]: $\text{int cl } \mathcal{K} = \mathcal{K}$ (в последнем случае, как правило, рассматриваются так называемые

множества конечного периметра [77, 119, 149, 157, 169]). Тем не менее, существуют и другие определения [130], претендующие на аксиоматическую строгость. В настоящей работе структура \mathcal{E} не конкретизируется, но считается достаточно богатой, чтобы составлять подкласс борелевских множеств в \mathbb{E}_3 . Под конфигурацией какого-либо сплошного тела далее всюду подразумевается некоторый ее элемент. Через $V : \mathcal{E} \rightarrow |\mathbb{R}|$ обозначается инвариантная мера объема.

Пространство тензоров ранга $R \in |\mathbb{Z}|$ над \mathbb{E}_3 записывается как $\mathbb{E}_3^{(R)}$. Символ тензорного (или диадного) произведения всюду опускается. Тензор $\mathbf{E}^\Gamma \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ понимается как транспонированный к тензору $\mathbf{E} \in \mathbb{E}_3^{(2)}$. Через $\mathbf{I} \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ обозначается единичный тензор.

Вводится группа (по скалярному умножению) $\mathbb{O}^+ \subset \mathbb{E}_3^{(2)}$ собственно ортогональных тензоров, задающих преобразования поворота на \mathbb{E}_3 . При наличии известного отсчетного положения каждый такой тензор характеризует пространственную ориентацию трехмерного тела (например, кристаллической решетки) и в этом случае для краткости называется просто ориентацией. В вопросах, связанных с представлением текстуры, ориентационное пространство отождествляется с \mathbb{O}^+ или его некоторой параметризацией. Через $\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})$ записывается поворот на угол $\alpha \in [0, \pi]$ вокруг оси направляющего вектора $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$ [116, 127, 128]:

$$\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) = \cos \alpha \mathbf{I} + \sin \alpha \mathbf{u} \times \mathbf{I} + (1 - \cos \alpha) \mathbf{u} \mathbf{u}.$$

Под $\mathbf{R}(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ понимается поворот против часовой стрелки от \mathbf{u} к вектору $\mathbf{v} \in \mathcal{U}$ в содержащей их плоскости:

$$\mathbf{R}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \mathbf{R} \left(\arccos(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}), \frac{\mathbf{u} \times \mathbf{v}}{\|\mathbf{u} \times \mathbf{v}\|} \right).$$

Естественная метрика Римана, которой наделено ориентационное пространство, индуцирует на нем следующую функцию $\mu_0 : \mathbb{O}^{+2} \rightarrow |\mathbb{R}|$ расстояния [84, 127, 128] ($\mathbf{O}, \mathbf{P} \in \mathbb{O}^+$):

$$\mu_0(\mathbf{O}, \mathbf{P}) = \left\| \ln(\mathbf{O} \cdot \mathbf{P}^\top) \right\|^{(2)} = \left\| \ln(\mathbf{P} \cdot \mathbf{O}^\top) \right\|^{(2)},$$

где $\| \cdot \|^{(2)} : \mathbb{E}_3^{(2)} \rightarrow |\mathbb{R}|$ – норма, определенная в операторном $\| \cdot \|$ -согласованном смысле ($\mathbf{E} \in \mathbb{E}_3^{(2)}$):

$$\| \mathbf{E} \|^{(2)} = \sup_{\mathbf{u} \in \mathcal{U}} \| \mathbf{E} \cdot \mathbf{u} \|.$$

Введенное расстояние обладает свойством бинвариантности, т.е. для любых поворотов/ориентаций \mathbf{L} , \mathbf{R} , \mathbf{O} и \mathbf{P} удовлетворяет

$$\mu_0(\mathbf{L} \cdot \mathbf{O} \cdot \mathbf{R}, \mathbf{L} \cdot \mathbf{P} \cdot \mathbf{R}) = \mu_0(\mathbf{O}, \mathbf{P}).$$

Как следствие,

$$\mu_0(\mathbf{O}, \mathbf{P}) = \mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{O} \cdot \mathbf{P}^\top) = \mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{O}^\top \cdot \mathbf{P}) = \mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{P} \cdot \mathbf{O}^\top) = \mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{P}^\top \cdot \mathbf{O}).$$

Другое важное свойство состоит в том, что $(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) \in \mathbb{O}^+)$:

$$\mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})) = \frac{\text{tr} \mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) - 1}{2} = \alpha.$$

Иными словами, метрическое расстояние между ориентациями совпадает с величиной наименьшего угла поворота, который их связывает.

При описании ориентаций кристаллической решетки важно учитывать ее симметрию, т.е. наличие геометрически неотличимых друг от друга конфигураций. Известно, что для любого существующего типа решетки преобразования поворотной симметрии формируют некоторую конечную подгруппу $\mathbb{S}^+ \subset \mathbb{O}^+$. Для определенности, элементы подобных групп в настоящей работе полагаются заданными в том отсчетном положении, относительно которого фиксируются ориентации. Пусть ориентация рассматриваемой решетки определяется как $\mathbf{O} = \sum_{i=3}^3 \mathbf{k}_i \mathbf{l}_i$, где $\{\mathbf{k}_i \in \mathcal{U}\}$ – жестко связанные с ней ортогональные векторы в текущей конфигурации, а $\{\mathbf{l}_i \in \mathcal{U}\}$ – в отсчетной. Тогда \mathbf{O} симметрически эквивалентна ориентации $\mathbf{O} \cdot \mathbf{S}$ (порядок сомножителей обуславливается обозначенной определенностью), где $\mathbf{S} \in \mathbb{S}^+$. Следует заметить, что введенное отношение является эквивалентностью [14] в строгом смысле (из групповых свойств непосредственно следуют требуемые рефлексивность,

симметричность и транзитивность), а потому ориентационное пространство разбивается им на классы (можно также сказать, что \mathbb{S}^+ факторизует \mathbb{O}^+).

Неединственность представлений ориентаций для конкретной группы \mathbb{S}^+ поворотных симметрий устранима за счет сужения соответствующего пространства до подмножества, включающего равно по одному представителю из каждого класса эквивалентности. Замыкание подобного множества называется фундаментальной областью действий (или симметрий) \mathbb{S}^+ . Сами представители, вообще говоря, могут быть выбраны различными способами, но удобно отдать предпочтение ориентациям с наименьшим углом [80, 94]. Пусть $\mathcal{R} \subset \mathbb{O}^+$ – фундаментальная область, отвечающая такому случаю. Тогда необходимо ($\mathbf{O} \in \mathcal{R}$, $\mathbf{S} \in \mathbb{S}^+$)

$$\mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{O}) \leq \mu_0(\mathbf{I}, \mathbf{O} \cdot \mathbf{S}).$$

Из записанного условия выводятся ограничения на параметры, используемые для представления фундаментальной области. В частности, при $\mathbf{O} = \mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})$ и $\mathbf{S} = \mathbf{R}(\beta, \mathbf{v})$ [94, 116] можно получить:

$$\mathcal{R} = \left\{ \mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) \mid \alpha \in [0, \pi], \mathbf{u} \in \mathcal{U}, \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \leq \operatorname{tg} \frac{\beta}{2}, \mathbf{R}(\beta, \mathbf{v}) \in \mathbb{S}^+ \right\}.$$

Выражение $\operatorname{tg}(\alpha/2)\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}$ в записанных условиях определяет для фиксированного \mathbf{v} некоторую плоскость. Следовательно, при подходящем выборе параметров пространственный образ фундаментальной области рассматриваемого способа построения представляет собой многогранник. Соответствующей параметризации, иногда относимой к типу «neo-Eulerian» [94], отвечают векторы Родрига. Для явного обозначения их связи с ориентациями можно ввести отображение $\rho_0 : \mathbb{O}^+ \rightarrow \mathbb{E}_3$ ($\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) \in \mathbb{O}^+$):

$$\rho_0(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})) = \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2} \mathbf{u}.$$

В большинстве вычислительных приложений оказывается полезным тот факт, что идентичное выражение получается также делением векторной (мнимой) части кватерниона, представляющего ориентацию, на действительную. В данной работе

векторы Родрига применяются для визуализации различных совокупностей ориентаций. Во всех случаях в используемую систему координат отображается только фундаментальная область. Точки за пределами образа предварительно проецируются внутрь путем замены соответствующей ориентации на представителя из ее класса эквивалентности. Эту операцию можно определить формально как результат специального отображения $\rho: \mathbb{O}^+ \rightarrow \rho_0(\mathcal{R})$ ($\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})$):

$$\rho(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})) = \min_{\mathbf{S} \in \mathbb{S}^+} \|\rho_0(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) \cdot \mathbf{S})\| \mathbf{u}.$$

На рисунке 1.1 представлен многогранник, графически изображающий фундаментальную область (т.е. непосредственно визуализирующий образ $\rho_0(\mathcal{R})$) для поворотной группы октаэдрической симметрии (такой, в частности, обладают все кубические решетки). С геометрической точки зрения это есть куб со стороной полудлины $\text{tg}(\pi/8)$, каждый угол которого отсекается равнонаклоненной к ребрам плоскостью, расположенной на расстоянии $\text{tg}(\pi/6)$ от его центра. Цветом показан коэффициент объемного искажения [94] параметризации Родрига (т.е. множитель при частных дифференциалах в координатном выражении инвариантной меры). В случае равномерного распределения ориентаций скопление изображающих точек на периферии области будет визуально приблизительно в 1.88 раз менее плотным по сравнению с ее центром.

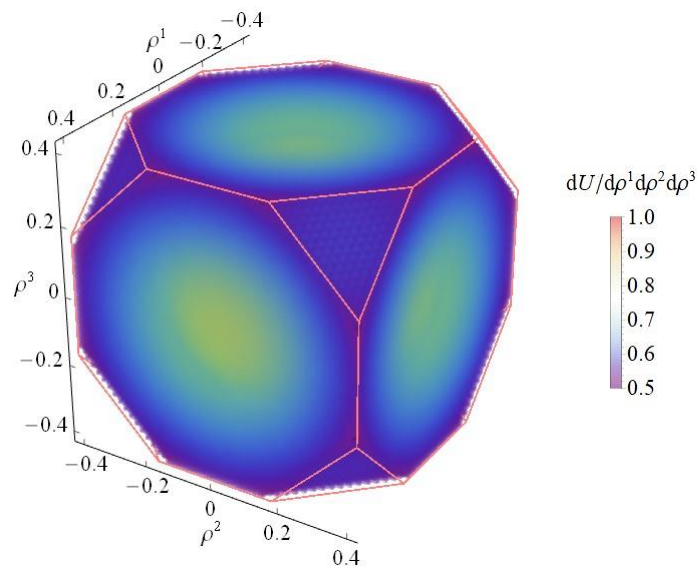


Рисунок 1.1. Объемное искажение параметризации Родрига внутри геометрического образа фундаментальной области для поворотной группы октаэдрической симметрии в ориентационном пространстве

Система борелевских подмножеств на \mathbb{O}^+ обозначается \mathcal{O}^+ . Мерой распределения ориентаций (МРО) называется отображение вида $\Phi: \mathcal{O}^+ \rightarrow [0,1]$, удовлетворяющее условию нормировки: $\Phi(\mathbb{O}^+) = 1$. Для заданного поликристалла подобная характеристика дает наиболее полное представление о его текстуре. Величина $\Phi(\vartheta) \in [0,1]$ трактуется как объемная доля кристаллической решетки, ориентация которой принадлежит множеству $\vartheta \in \mathcal{O}^+$. МРО, инвариантная относительно любых ортогональных преобразований подмножества-аргумента, называется однородной и обозначается U . Таким отображением, называемым также мерой Хаара [6, 40], определяется однородное (т.е. равномерное) распределение ориентаций. Дифференциальная форма $dU: \mathbb{O}^+ \rightarrow |\mathbb{R}|$ допускает следующее выражение ($\alpha \in [0, \pi]$, $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$) [132]:

$$dU(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})) = \frac{1 - \cos \alpha}{4\pi^2} d\alpha dS(\mathbf{u}),$$

где $dS: \mathcal{U} \rightarrow |\mathbb{R}|$ – дифференциальная форма площади единичной сферы. На последней также вводится сигма-алгебра \mathcal{U} борелевских подмножеств и соответствующая (инвариантная) мера $S: \mathcal{U} \rightarrow [0, 4\pi]$, нормированная как $S(\mathcal{U}) = 4\pi$.

Если МРО Φ абсолютно непрерывна [30, 40] относительно U , то существует ее плотность (производная Радона-Никодима) – измеримая функция $\phi: \mathbb{O}^+ \rightarrow |\mathbb{R}|$ такая, что ($\vartheta \in \mathcal{O}^+$)

$$\Phi(\vartheta) = \int_{\vartheta} \phi dU = \int_{\mathbf{O} \in \vartheta} \phi(\mathbf{O}) dU(\mathbf{O}).$$

Традиционно ϕ называется функцией распределения ориентаций (ФРО), и в большинстве приложений текстурного анализа оперируют именно с ней. Однако в теоретических построениях настоящей работы рассматриваются в том числе

дискретные МРО, для которых ФРО в указанном выше смысле не существуют. Их простейшим примером является сосредоточенная в некоторой ориентации \mathbf{O} мера Дирака [30], равная $\mathbf{O} \in \mathcal{O}$ на множестве-аргументе $\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$.

Следует обратить внимание, что нетривиальность группы \mathbb{S}^+ поворотной решеточной симметрии обуславливает существование различных МРО, равноправных с точки зрения описания текстуры в поликристалле. От данной особенности можно избавиться, потребовав для каждой допустимой МРО Φ выполнения условия ($\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$, $\mathbf{S} \in \mathbb{S}^+$):

$$\Phi(\mathcal{O}) = \Phi(\mathcal{O} \cdot \mathbf{S}).$$

В этом случае ее определение целесообразно ограничить соответствующими подмножествами фундаментальной области – при необходимости из записанного требования восстанавливаются значения и на остальных аргументах. Впрочем, поскольку любая МРО может быть легко «симметризована» осреднением по рассматриваемой группе [6], для целей настоящей работы необходимость в обозначенном условии отсутствует.

Заметим также, что МРО, вообще говоря, является характеристикой поликристаллического представительного объема. На конфигурации $\mathcal{K} \in \mathcal{E}$ макроскопического тела имеет смысл рассматривать ее поле (ПМРО), т.е. отображение вида $\Phi: \mathcal{K} \times \mathcal{O}^+ \rightarrow [0,1]$. С его помощью каждой точке, задаваемой радиус-вектором из \mathcal{K} , в соответствие ставится своя МРО.

1.2. Связанные оптимизационные подзадачи для стадий функционирования изделия и деформационной обработки заготовки

Уточним постановку ЗФОП с использованием введенных в разделе 1.1 математически формализованных определений. Будем рассматривать стадии функционирования готового изделия и процесса его изготовления из заготовки методами пластического деформирования, предполагая для каждого обозначенного этапа решение отдельной оптимизационной подзадачи. Для краткости будем называть их также F- и T-подзадачей соответственно.

В F-подзадаче необходимо найти ПМРО $\hat{\Phi} \in \mathcal{F}$ на конфигурации \mathcal{P} изделия, которое обеспечивает для него наилучшее функционирование:

$$F_0(\hat{\Phi}) = \min_{\Phi \in \mathcal{F}} F_0(\Phi); \quad (1.1)$$

$$F_c(\hat{\Phi}) \leq 0, \quad c \in \overline{1, N_{fc}}. \quad (1.2)$$

В приведенной постановке полагаются заданными: \mathcal{F} – множество некоторым образом параметризованных ПМРО; $F_0: \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ – критерий, выражающий качество функционирования; $\{F_c: \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}\}$ – функционалы, описывающие его ограничения ($c \in \overline{1, N_{fc}}$), и $N_{fc} \in |\mathbb{Z}|$ – их количество.

В свою очередь, T-подзадача состоит в поиске значения $\hat{\tau} \in \mathbb{R}^{N_{tv}}$ вектор-строки управляющих параметров (ВСУП) для режима деформирования заготовки, при котором на \mathcal{P} реализуется ПМРО, наиболее близкое к $\hat{\Phi}$ (т.е. решению T-подзадачи):

$$T_0(\hat{\Phi}, \Psi(\hat{\tau})) = \min_{\tau \in \mathcal{F}} T_0(\hat{\Phi}, \Psi(\tau)); \quad (1.3)$$

$$T_c(\hat{\tau}) \leq 0, \quad c \in \overline{1, N_{tc}}. \quad (1.4)$$

Здесь считаются известными: $N_{tv} \in \mathbb{Z}^+$ – размерность ВСУП (количество переменных в виде действительных чисел) и \mathcal{F} – множество их возможных значений; $T_0: \mathcal{F}^2 \rightarrow |\mathbb{R}|$ – критерий близости двух (параметризованных) ПМРО; $\{T_c: \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}\}$ – функции ограничений ($c \in \overline{1, N_{tc}}$); $N_{tc} \in |\mathbb{Z}|$ – их количество; и, наконец, $\Psi: \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$ – оператор, определяющий $\Psi(\tau) \in \mathcal{F}$ как ПМРО на \mathcal{P} в зависимости от предшествующего режима деформирования заготовки, задаваемого ВСУП $\tau \in \mathcal{F}$. В общем случае каждое вычисление последнего отображения предполагает полное решение краевой задачи, соответствующей рассматриваемой технологической операции.

Система (1.1)–(1.4) описывает общую структуру ЗФОП, не устанавливая конкретный тип составляющих ее оптимизационных подзадач. Можно отметить, что F-подзадача рассматривает текстуру в качестве переменной оптимизации, а T-

подзадача – как переменную состояния. Сами текстуры представляются с помощью ПМРО, поэтому для того, чтобы конструктивно говорить о решении F-подзадачи и ЗФОП в целом, в первую очередь следует определить их класс. Практические соображения приводят к необходимости рассмотрения некоторого семейства параметризованных ПМРО (именно, \mathcal{F}). Поскольку в этом случае происходит редуцирование всего их многообразия, возникает интерес к наборам параметров, способным дать высокую точность аппроксимации. Для целей оптимизации желательно получение их пространства как можно меньшей размерности, что, как правило, противоречит первому предпочтению. Здесь также следует обозначить вопрос о физической реализуемости (или достижимости) в режимах деформирования, определяемых диапазоном допустимых ВСУП T-подзадачи, тех ПМРО, которые получаются при решении F-подзадачи в рассматриваемом классе. Помимо этого, отдельного внимания заслуживает возможность учета в T-подзадаче (при построении T_0) значимостей различных параметров с точки зрения их вклада в требуемые условия функционирования. Разрешению сформулированных проблем посвящена глава 3 настоящей диссертации.

Для приведенной выше постановки имеет место аналогия с так называемыми задачами биоптимизации [34]. Каждое вычисление Φ можно трактовать как удовлетворение ограничений специального типа, характеризуемого алгебраическими и дифференциальными (обыкновенными и в частных производных) уравнениями. Система всех таких уравнений составляет математическую модель, позволяющую установить текстуру в изделии, получаемую в результате реализации конкретного режима деформирования заготовки.

В завершение раздела отметим, что общая формулировка F-подзадачи допускает рассмотрение целевых критериев, минимумам которых отвечает соответствие тех или иных эффективных свойств поликристаллических агрегатов требуемым классам. Например, для упругих характеристик (описываемых тензором четвертого ранга, инвариантного относительно главных и побочных

перестановок индексов) такого агрегата может быть поставлен вопрос об ориентациях решеток, необходимых для обеспечения заданной симметрии в иерархии из восьми типов [158]. В случае, когда компоненты тензора упругих модулей известны в некотором (произвольно ориентированном) ортонормированном базисе, для проверки его принадлежности заданному классу симметрии применим подход на основе минимизации невязки соответствующей аппроксимации по различным оценкам норм [20, 158. 160].

2. Моделирование процессов обработки поликристаллических заготовок методами интенсивной пластической деформации с описанием текстурообразования

Equation Chapter 2 Section 1

Многоуровневые конститутивные модели

Физически обоснованный подход к количественному описанию процессов деформационного текстурообразования состоит в применении многоуровневых конститутивных моделей упруговязкопластичности. Подобные модели, в отличие от распространенных макрофеноменологических теорий, предоставляют информацию о внутреннем состоянии деформируемой среды. Этого позволяют добиться вводимые в структуру определяющих уравнений дополнительные переменные, характеризующие реализацию физических механизмов перестроения рассматриваемого материала на различных структурных и масштабных уровнях (за счет скольжения краевых дислокаций, переориентации кристаллитов и т.п.). По всей видимости, данный подход возник из теории пластичности кристаллов (англ. «CP», «crystal plasticity»), сформулированной в пионерских работах Bishop, Elam, Hill, Lin, Masimo, Sachs, Taylor и др. [59, 60, 99, 105, 142, 156]. Развитию этого направления посвящено значительное количество публикаций, представляющих новые соотношения, численные реализации и конкретные примеры приложений. Содержащие их обзоры можно найти в статьях Anand, McDowell, Roters, Van Houtte, Трусова и др. [38, 39, 103, 104, 138-140]. Теоретические вопросы, связанные с многоуровневым подходом, обсуждаются, например, в публикациях Busso [63], Luscher [103, 104] и др.. В настоящее время модели рассматриваемого класса широко используются для описания процессов неупругого деформирования металлов и сплавов. Следует заметить, что основу подавляющего большинства их вычислительных реализаций составляет МКЭ (англ. «FEM», «finite element method/modeling»), так что данный класс нередко обозначается как «CP FEM». Условно различают три типа таких моделей [39] –

прямые, самосогласованные и статистические [38]; в качестве некоторой вариации последних можно также выделить «ориентационно-континуализированные» [49, 94].

В прямых моделях различным точкам интегрирования соответствуют отдельные кристаллиты. По своей сути они являются одномасштабными, поскольку описывают механическое состояние тела непосредственно в терминах мезоскопических характеристик. Тем не менее, их можно рассматривать как многоуровневые с точки зрения структурного разделения определяющих уравнений. Данный подход, хотя и представляется перспективным для физически-ориентированного моделирования, на практике оказывается весьма ресурсоемким. Указанное обстоятельство препятствует его реализации в вычислительно тяжелых проблемах, к которым относится в том числе сформулированная ЗФОП.

Самосогласованные модели, также называемые моделями среднего поля, оперируют с включениями кристаллитов в среду (матрицу), свойства которой эффективно воспроизводят поликристалл. В последние десятилетия для реализации таких подходов активно применяется быстрое преобразование Фурье [83. 97], позволяющее уменьшить время вычисления локального отклика материала. К сожалению, подобные модели по-прежнему оказываются довольно ресурсоемкими, что ограничивает их применение для решения реальных задач интересующего класса.

В статистических моделях точкам интегрирования соответствуют макроскопические представительные объемы материала, воспроизводимые агрегатами из конечного (как правило, порядка $10^2 - 10^3$) числа кристаллитов. С физической позиции кристаллиты являются мезоскопическими представительными фрагментами решеток и обычно ассоциируются с зернами или субзернами. Состояние каждого кристаллита характеризуется своим набором переменных, которые тем или иным образом осредняются по всему агрегату при определении отклика материальной точки. Такой подход выдерживает баланс между физической обоснованностью и вычислительной эффективностью

реализации, что обуславливает его выбор в качестве инструмента моделирования в настоящей работе. Предоставляемое им описание текстуры имеет вид выборки ориентаций решеток кристаллитов и (опционально) их объемов.

Отдельно следует упомянуть модели [49, 94], в которых мезоскопические характеристики решетки задаются континуальными распределениями по ориентационному пространству или подходящей фундаментальной области. Для определения их эволюции на соответствующем множестве необходимо решать начально-краевую задачу. Необходимо заметить, что в основе подобного подхода лежит предположение о взаимно-однозначном соответствии между кристаллитом и его начальной ориентацией, которое приводит к рассмотрению уравнения баланса ФРО. Его интегрирование зачастую сопряжено с вычислительными трудностями, вызванными резкими перепадами градиента (на ориентационном пространстве) скорости поворота. Данное обстоятельство оказывается прямым следствием возможности кристаллитов с близкими ориентациями решеток иметь существенно различающийся спин. Модели описанного типа выше обозначены как «ориентационно-континуализированные», хотя подобная распределенность мезосостояния видится вполне допустимой и по некоторым другим параметрам. Возвращаясь к статистическим моделям, отметим, что их классические постановки можно интерпретировать как бессеточный способ численной реализации решения балансового уравнения ФРО с использованием ансамбля абстрактных лагранжевых частиц, движению которых отвечают траектории кристаллитов в ориентационном пространстве. Определяющим преимуществом здесь конкретно статистических формулировок представляется относительно большая очевидность физически обоснованного усложнения, в том числе за счет учета взаимодействий отдельно взятых кристаллитов.

Контактные начально-краевые задачи

Претендующее на физическую адекватность описание технологических операций обработки материалов методами ИПД требует рассмотрения

контактных начально-краевых задач механики деформируемого твердого тела (МДТТ). В роли контактирующих тел в них выступают обрабатываемая заготовка и инструмент, реализующий деформирование. Характерной особенностью таких задач является присутствие различного рода нелинейностей. Прежде всего, области контакта зачастую априори неизвестны и тогда должны быть определены как часть решения. При наличии в них трения появляются зоны прилипания и скольжения, в последних из которых реализуются условия, требующие для корректного учета введения относительных скоростей материальных точек заготовки и инструмента. В общем случае эти скорости также являются искомыми. Кроме того, нелинейными могут быть определяющие соотношения материала заготовки (физическая нелинейность), а необходимость учета больших градиентов перемещений, характерных для рассматриваемых процессов, приводит к геометрически нелинейным постановкам. Следует заметить, что к настоящему времени контактными задачам МДТТ посвящено огромное количество публикаций. Для освещения ключевых вопросов далее отмечается лишь часть из них, состоящая из некоторых основополагающих статей, обзоров и монографий.

Наиболее ранние исследования в области контактных задач восходят к проблеме Герца [82] о соприкосновении двух больших (по отношению к площади общей границы) однородных изотропно упругих тел. Формулировки и решения подобных задач изначально осуществлялись в рамках существенных допущений, которые, тем не менее, позволили получить ряд важных результатов [8, 46]. Начиная с работ Синьорини [147, 148], контактные задачи начали активно рассматриваться в контексте систем с односторонними ограничениями. В классической постановке соответствующая задача состоит в поиске равновесной конфигурации упругого тела, соприкасающегося с жестким основанием при отсутствии трения. Значительных теоретических результатов, затрагивающих в том числе вопросы существования и единственности решений, для подобных формулировок удалось достичь с развитием методов вариационного исчисления. Обзору исследований в области этих подходов посвящена публикация Кравчука [15], где описаны численно-аналитические способы решения задачи Синьорини и

ее некоторых обобщений, в том числе учитывающих силы трения. В книге Barber [54] собраны различные приемы, используемые в контактной механике линейно-упругих материалов, а также сформулировано большое количество задач на их применение; приведены ссылки на актуальные исследования в данных направлениях.

Следует заметить, что с физической точки зрения наиболее детальными представляются модели трения, конструируемые на стыке МДТТ и трибологии [9-11, 29, 98]. Постановки такого рода ориентированы на рассмотрение шероховатостей контактирующих зон, определяемых их микрогеометрическими характеристиками (вообще говоря, эволюционирующими). Так или иначе, использование даже простых законов трения типа Кулона существенно усложняет задачу, делая практически невозможным ее аналитическое решение. В связи с этим в данной области возникает особый интерес к разработке специальных численных методов.

Весьма содержательный обзор контактных алгоритмов, опубликованных до 2001 года, приведен в статье Бураго и Кукуджанова [5]. В целом для задач МДТТ одним из наиболее развитых вычислительных подходов к решению можно признать МКЭ. В работе Pore и др. [131] описаны линейные и нелинейные модели контакта на базе данного метода, реализованные в современных коммерческих пакетах прикладных программ, например, в Ansys, Abaqus, Nastran-Patran и Solidworks. Здесь отдельного внимания заслуживает вопрос о дискретном представлении областей соприкосновения. В первую очередь речь идет об определении типов возможных контактных пар, представляемых различными сочетаниями частей КЭ: узлов, ребер (преимущественно для двумерных задач) и граней (поверхностных фасеток). Классические модели типа «узел-узел», обладающие наибольшей простотой с точки зрения реализации, не допускают взаимных проскальзываний узлов, а потому подходят только для геометрически линейных задач с изначально соприкасающимися телами.

Для случаев больших градиентов перемещений широкое распространение получили подходы «узел-поверхность». Подобные формулировки охватывают

значительный класс проблем, к которым можно отнести и представляющее интерес описание деформирования заготовки контактирующим с ней инструментом. Для таких задач характерна асимметрия с точки зрения податливостей соприкасающихся тел: инструмент полагается существенно более жестким по отношению к заготовке. На практике данное обстоятельство зачастую приводит к приближению одностороннего контакта (как для постановки Синьорини). Контактные пары в его случае удобно образовать из узлов заготовки (деформируемой среды) и поверхностных фасеток инструмента (тела с предписанной кинематикой). Для их обозначения при этом общеупотребимы термины «slave»-узлы и «master»-фасетки соответственно. Следует отметить, что применение описанного подхода представляет трудности в множественно- и/или самоконтактных задачах, однако такие формулировки выходят за рамки настоящей работы.

В последние десятилетия были также разработаны схемы типа «поверхность-поверхность». Данные модели, как правило, отсылают к алгоритмам [134, 135], основанным на так называемых «mortar»-методах [51, 55, 56] декомпозиции областей. Эти приемы не требуют совпадения узлов КЭ-сеток тел вдоль контактирующих границ, что позволяет применять их в том числе для расчетов геометрически нелинейных случаев. Данный способ представляется наиболее уместным в неодносторонних контактных задачах.

При моделировании квазистатических процессов деформирования с большими градиентами перемещений определенными преимуществами обладают скоростные формулировки уравнения равновесия [28]. В начально-краевые задачи для подобных уравнений входят скорости точек деформируемой среды, интегрирование поля которых позволяет непосредственно устанавливать ее конфигурацию в рассматриваемый момент времени. Мера напряженного состояния присутствует в таких постановках вместе с производной по параметру времени. Как следствие, дискретизация расчетной области задачи лагранжевыми КЭ приводит на каждом временном срезе к СЛАУ относительно скоростей узловых перемещений, в правую часть которой входят скорости изменения

узловых сил. Учет краевых условий скоростного типа обычно производится путем модификации в этой СЛАУ строк, относящихся к поверхностным узлам. Однако в случае контактной задачи, допускающей проскальзывание с трением, в соответствующей зоне имеют место специальные смешанные условия: в скоростях по компоненте перемещений, нормальной к поверхности соприкосновения, и в конечной форме по тангенциальным компонентам силы. В представляемой работе предлагается способ [159] реализации таких соотношений в рамках МКЭ с использованием стандартного для вычислительной практики приема модификации СЛАУ. Следует заметить, что распространенные в литературе контактные формулировки, как правило, основываются на балансовых уравнениях нулевого дифференциального порядка по напряжениям. К таковым относится, в том числе, закон сохранения количества движения, рассматриваемый при динамическом моделировании. В их случае указанная выше особенность не имеет места.

Генерация текстур по экспериментальным данным

При моделировании процессов деформирования предварительно текстурированных материалов возникает задача генерации выборки ориентаций, распределенных в соответствии с имеющимися данными (полученными, например, экспериментально). В случае известной МРО удовлетворяющая ей выборка может быть получена с помощью стандартных методов теории вероятности и математической статистики. Практичность тех или иных подходов при этом определяется способом ее численного представления. Например, при использовании аппроксимаций аналитическими функциями наиболее уместными могут оказаться методы типа обратного преобразования [70]. В случае задания частот в малых геометрически простых ячейках ориентационного пространства применимы схемы с разыгрыванием непрерывных равномерных распределений. Метод [123], предлагаемый в данной работе, состоит в предварительном построении взвешенной выборки случайных равномерно распределенных

ориентаций, статистически приближающей ФРО, из которой необходимые элементы могут генерироваться как дискретные случайные величины.

Экспериментальные сведения о текстурах зачастую изображаются графически в виде полюсных фигур. Такие изображения дают информацию о так называемой функции распределения направлений (ФРН; англ. axis distribution function) [62]. Значением этой функции является плотность объемной доли кристаллитов, выбранное направление решетки которых совпадает с другим выбранным направлением в некоторой фиксированной системе координат. Математическое соотношение между ФРО и ФРН описывается так называемым фундаментальным уравнением текстурного анализа [62]. Вопросам, связанным с его решением, посвящено значительное количество работ [62, 64, 116, 154]. К настоящему времени создано множество алгоритмов и конкретных программных реализаций, позволяющих восстановить ФРО по конечному набору фигур. Среди используемых для этой цели приемов можно выделить основанные на 1) разложении в ряды Фурье (преимущественно – по симметризованным обобщенным сферическим гармоникам) [62, 66, 101, 102, 165, 166]; 2) аналитической аппроксимации текстурных компонент [71, 81, 86, 107-110, 163]; а также 3) прямой дискретизации пространств ориентаций и направлений [85, 87, 109, 110, 129, 141, 161]. Более детально перечисленные группы подходов обсуждаются во вступлении к главе 3 данной диссертации.

В качестве альтернативы в работе предлагается подход [123] типа Монте-Карло, являющийся статистическим аналогом «векторного метода» [141, 161]. Его процедура состоит в равномерном заполнении ориентационного пространства случайными точками, для которых строятся соответствующие заданным полюсным фигурам образы-направления. Неизвестными здесь являются значения ФРО на сгенерированных элементах. В рамках вероятностной интерпретации фундаментального уравнения указываемое на конкретной фигуре значение плотности в произвольной точке пространства направлений может быть вычислено осреднением искомых величин по всем ориентациям, попадающим в ее малую окрестность при рассматриваемом отображении. Как нетрудно

заметить, указанная связь представляет собой линейное алгебраическое уравнение. Записав его для некоторого множества точек на каждой из фигур, приходим к системе, обобщенное решение которой определит весовые коэффициенты для требуемой выборки ориентаций. Примечательно, что матрица получаемой в результате СЛАУ содержит большое количество нулей, причем все ненулевые компоненты оказываются равными между собой. По сравнению с описанными в литературе методами предлагаемый подход представляется более простым в реализации, поскольку не требует проведения и согласования в явном виде дискретизаций пространств ориентаций и направлений. По существу, его процедура производит случайную частичную оцифровку фигур, достаточную для цели генерации ориентаций, в совокупности воспроизводящих текстурные данные.

2.1 Концептуальная постановка

Формулируемая в следующем разделе 2.1 математическая модель для описания деформационной обработки заготовки отвечает ряду некоторых физических предположений о рассматриваемом процессе. Перечислим основные из них, концептуально описывающие постановку задачи.

1. Рассматривается технологическая операция обработки сплошной (на макроскопическом уровне) поликристаллической заготовки, реализуемая ИПД при помощи абсолютно жесткого инструмента (тела с пренебрежимо малыми деформациями).
2. Моделируемый процесс приближается квазистатическим и (исключительно в целях упрощения изложения) изотермическим.
3. Начальное состояние материала заготовки является естественным [35, 157].
4. На фрагментах поверхности заготовки, граничащих с инструментом, реализуются контактные краевые условия с трением, подчиняющимся закону Кулона–Зибеля. На остальных фрагментах поверхности допускается действие кинематических, квазистатических или (в более общем случае) смешанных

краевых условий. Зоны контакта для каждого момента времени априори неизвестны (должны быть определены как часть решения).

5. Материальные точки заготовки физически соответствуют макроскопическим представительным объемам поликристалла, являющихся агрегатами из статистически достаточного (репрезентативного) числа однофазных кристаллитов (т.е. зерен, субзерен или их фрагментов) – однородных элементов мезоуровня.

6. Макроскопический отклик (включающий физико-механические свойства и меры напряженного и деформированного состояний) каждой материальной точки заготовки связываются с аналогичными характеристиками кристаллитов, статистически согласованно [39] осредненными по соответствующему агрегату в предположении модифицированной гипотезы Фойгта (об однородности градиента скорости частиц в пределах отдельного представительного объема).

7. На макро- и мезоуровне градиент скорости деформирования заготовки раскладывается на упругую (включающую чистое искажение и квазитвердый поворот) и вязкопластическую составляющие в соответствии с мультипликативным разложением градиента места; напряженное состояние удовлетворяет анизотропному закону Гука в скоростной релаксационной форме [39].

2.2. Математическая постановка

Макроуровень

Пусть задана условно-неподвижная декартова ортогональная система эйлеровых координат, положение в которой конкретизируется вектор-строкой $\mathbf{r} = (r^1, r^2, r^3) \in \mathbb{R}^3$. К такой системе далее будем обращаться как к лабораторной (ЛСК). Обозначим $\{\mathbf{l}^i \in \mathcal{S}\}$ – векторы соответствующего координатного [47] базиса ($i \in \overline{1,3}$). Введем в рассмотрение взаимно-однозначное отображение $\mathbf{E}: \mathbb{R}^3 \leftrightarrow \mathbb{E}_3$, выражающее через \mathbf{r} радиус-вектор $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^3 r^i \mathbf{l}^i \in \mathbb{E}_3$, а также

$\mathbf{R} : \mathbb{E}_3 \leftrightarrow \mathbb{R}^3$ – обратное к нему, так что радиус-вектор $\mathbf{e} \in \mathbb{E}_3$, в свою очередь, параметризует вектор-строку $\mathbf{R}(\mathbf{e}) = (\mathbf{l}^1 \cdot \mathbf{e}, \mathbf{l}^2 \cdot \mathbf{e}, \mathbf{l}^3 \cdot \mathbf{e}) \in \mathbb{R}^3$: $\mathbf{E}(\mathbf{R}(\mathbf{e})) = \mathbf{e}$, $\mathbf{R}(\mathbf{E}(\mathbf{r})) = \mathbf{r}$. Определим начальную конфигурацию $\mathcal{B}_0 \in \mathcal{E}$ заготовки, представленную радиус-векторами исходных позиций ее материальных точек. Каждая такая точка далее всюду ассоциируется с некоторым элементом $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$, а материальная область – с тем или иным подмножеством $\mathcal{A}_0 \subset \mathcal{B}_0$. Положение $\mathbf{r}(\mathbf{R}_0, t) \in \mathbb{E}_3$ в момент времени $t \in |\mathbb{R}|$ материальной точки $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$ описывается отображением $\mathbf{r} : |\mathbb{R}| \times \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{E}_3$, задающим актуальную конфигурацию $\mathcal{B}(t) = \mathbf{r}(t, \mathcal{B}_0)$. Будем считать \mathbf{r} , по крайней мере, дважды непрерывно-дифференцируемым по первому аргументу (именно, t) и при каждом его фиксированном значении являющемся диффеоморфизмом на соответствующий образ (т.е. $\mathcal{B}_0(t)$). В качестве отсчетного момента примем $t = 0$, так что $\mathbf{r}(0, \mathbf{R}_0) = \mathbf{R}_0$ и, следовательно, $\mathcal{B}(0) = \mathcal{B}_0$. Поскольку $\partial(\mathcal{B}(t)) = \mathbf{r}(\partial\mathcal{B}_0, t)$ при любом $t \in |\mathbb{R}|$, поверхность заготовки для актуальной конфигурации может быть определена как $\partial\mathcal{B}(t) = (\partial\mathcal{B})(t) = \partial(\mathcal{B}(t))$.

Введем систему \mathbf{r} -ассоциированных лагранжевых координат [33, 35, 157], указываемых вектор-строкой $\mathbf{q} = (q^1, q^2, q^3) \in \mathbb{R}^3$. Данную систему будем также называть деформируемой (ДСК). Определим поля $\{\mathbf{d}^i : |\mathbb{R}| \times \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{E}_3\}$, значениями $\{\mathbf{d}^i(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3\}$ которых являются сопряженные векторы соответствующего координатного базиса в момент $t \in |\mathbb{R}|$ для материальной точки $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$ ($i \in \overline{1,3}$). Обозначим $\nabla = \sum_{i=1}^3 \mathbf{d}^i \partial / \partial q^i$ – оператор Гамильтона на актуальных конфигурациях.

Введем в рассмотрение поля в ДСК, обладающие требуемой для записи формулируемых соотношений гладкостью, вида $\mathbf{X} : |\mathbb{R}| \times \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}$, где $R \in \mathbb{N}$, которые задают следующие тензорные характеристики заготовки в момент $t \in |\mathbb{R}|$, отнесенные к материальной точке $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$: $\mathbf{v}(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3$ – скорости перемещений; $\Sigma(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ – напряжений Коши; $\mathbf{Z}^c(t, \mathbf{R}_0), \mathbf{Z}^{vp}(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ – соответственно

упругой и вязкопластической аддитивных составляющих индифферентной меры скорости деформирования; $\mathbf{\Omega}(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ – спина подвижной системы координат (ПСК), в которой наблюдаются изменения мер напряженного и деформированного состояний [38, 39]; $\mathbf{\Pi}(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3^{(4)}$ – упругих модулей. В процессе деформирования поля введенных выше величин связаны при $t \in \mathbb{R}^+$ и $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$ системой уравнений:

$$\nabla \cdot \dot{\Sigma} - \nabla \cdot (\mathbf{v} \cdot \nabla \Sigma) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{R}_0 \in \text{int } \mathcal{B}_0; \quad (2.1)$$

$$\dot{\Sigma} + \Sigma \cdot \mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega} \cdot \Sigma = \mathbf{\Pi} : \mathbf{Z}^e; \quad (2.2)$$

$$\mathbf{Z}^e = \nabla \mathbf{v}^T - \mathbf{\Omega} - \mathbf{Z}^{vp}; \quad (2.3)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}. \quad (2.4)$$

Здесь: (2.1) – скоростной аналог уравнения равновесия [28]; (2.2) – анизотропный закон Гука в скоростной релаксационной форме; (2.3) – кинематическое определяющее соотношение [39]; и (2.4) – интегрируемое уравнение пространственных траекторий материальных точек. Для замыкания системы необходима конститутивная модель, устанавливающая зависимость $\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{\Pi}$ и \mathbf{Z}^{vp} от предыстории $\nabla \mathbf{v}^T$ (и, кроме того, описывающая деформационное текстурирование). Пока что ограничимся формальной записью операторных уравнений общего вида, охватывающего широкий класс возможных постановок ($t \in \mathbb{R}^+$, $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$):

$$\mathcal{L}(t, \mathbf{R}_0) = \left\{ \left(s, \nabla \mathbf{v}^T(s, \mathbf{R}_0) \right) \mid s \in [0, t] \right\};$$

$$\mathbf{\Omega}(t, \mathbf{R}_0) = \mathbf{\Omega}(\mathcal{L}(t, \mathbf{R}_0));$$

$$\mathbf{\Pi}(t, \mathbf{R}_0) = \mathbf{\Pi}(\mathcal{L}(t, \mathbf{R}_0));$$

$$\mathbf{Z}^{vp}(t, \mathbf{R}_0) = \mathbf{Z}^{vp}(\mathcal{L}(t, \mathbf{R}_0)).$$

Первое из записанных равенств определяет $\mathcal{L}(t, \mathbf{R}_0)$ как предысторию $\nabla \mathbf{v}^T$ в материальной точке $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$ до момента $t \in |\mathbb{R}|$; смысл остальных соотношений представляется очевидным. В последующих подразделах приведенные

соотношения конкретизируются на базе статистического варианта двухуровневой упруговязкопластической модели поликристалла.

Перейдем к постановке краевых условий для системы (2.1)-(2.4), допускающих возможность контакта заготовки с инструментом. Ограничимся рассмотрением случая пренебрежимо малых деформаций инструмента за счет контактного взаимодействия. Будем полагать заданной непрерывно-дифференцируемую функцию $T: |\mathbb{R}| \times \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, определяющую его поверхность $\partial \mathcal{F}(t) \subset \mathbb{E}_3$ в произвольный момент $t \in |\mathbb{R}|$ уравнением в ЛСК:

$$\partial \mathcal{F}(t) = \{ \mathbf{E}(\mathbf{r}) \mid \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3, T(t, \mathbf{r}) = 0 \}. \quad (2.5)$$

В этом смысле инструмент следует воспринимать как тело с предписанной кинематикой.

Под поверхностным фрагментом $\ell_0^c(t) \subset \partial \mathcal{B}_0$ геометрического контакта условимся понимать множество тех граничных точек заготовки в актуальной для момента $t \in |\mathbb{R}|$ конфигурации, которые располагаются на поверхности инструмента:

$$\ell_0^c(t) = \{ \mathbf{R}_0 \mid \mathbf{R}_0 \in \partial \mathcal{B}_0, \mathbf{r}(t, \mathbf{R}_0) \in \partial \mathcal{F}(t) \}. \quad (2.6)$$

Как правило, $\partial \mathcal{B}_0$ можно описать нулями некоторой функции $B_0: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$, определенной в ДСК (или, эквивалентно, ЛСК при $t = 0$):

$$\partial \mathcal{B}_0 = \{ \mathbf{E}(\mathbf{q}) \mid \mathbf{q} \in \mathbf{R}(\text{cl} \mathcal{B}_0), B(\mathbf{q}) = 0 \}.$$

В таком случае, подставляя $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r}(t, \mathbf{q})$ в формулу (2.5) в качестве выражения закона движения заготовки при $t \in |\mathbb{R}|$ и $\mathbf{q} \in \mathbf{R}(\text{cl} \mathcal{B}_0)$, получаем соотношение (2.6) в координатном виде:

$$\ell_0^c(t) = \{ \mathbf{E}(\mathbf{q}) \mid \mathbf{q} \in \mathbf{R}(\text{cl} \mathcal{B}_0), B(\mathbf{q}) = 0, T(t, \mathbf{r}(\mathbf{q}, t)) = 0 \}. \quad (2.6.a)$$

Вектор $\mathbf{v}^c(t, \mathbf{R}) \in \mathbb{E}_3$ скорости произвольной поверхностной точки инструмента полагается вычислимым в любой момент $t \in |\mathbb{R}|$ в занимаемом ей пространственном положении, указываемом радиус-вектором $\mathbf{R} \in \mathbb{E}_3$. Более

формально, для его значений считается известным с позиции ЛСК поле $\mathbf{v}^c : \mathcal{v}^c \rightarrow \mathbb{E}_3$, заданное на множестве

$$\mathcal{v}^c = \left\{ (t, \mathbf{R}) \mid t \in |\mathbb{R}|, \mathbf{R} \in \partial \mathcal{J}(t) \right\}.$$

Для удобства введем отображение $\bar{\mathbf{v}}^c : \mathcal{v}_0^c \rightarrow \mathbb{E}_3$, являющееся переопределением этого поля в терминах ДСК заготовки на границе с инструментом, т.е. с аргументами из множества

$$\mathcal{v}_0^c = \left\{ (t, \mathbf{R}_0) \mid t \in |\mathbb{R}|, \mathbf{R}_0 \in \ell_0^c(t) \right\}.$$

Рассматриваемые поля связаны очевидным соотношением $((t, \mathbf{R}) \in \mathcal{v}_0^c)$:

$$\bar{\mathbf{v}}^c(t, \mathbf{R}_0) = \mathbf{v}^c(t, \mathbf{r}(t, \mathbf{R}_0)). \quad (2.7)$$

Таким образом, $\bar{\mathbf{v}}^c(t, \mathbf{R}_0) \in \mathbb{E}_3$ понимается как вектор скорости инструмента, вычисленный в момент $t \in |\mathbb{R}|$ в точке $\mathbf{R}_0 \in \ell_0^c(t)$ (геометрически контактирующего поверхностного фрагмента заготовки). Аналогично далее трактуются все задаваемые на границе заготовки поля вида $\mathbf{X} : \mathcal{x}_0 \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}$, где $\mathcal{x}_0 \subset |\mathbb{R}| \times \partial \mathcal{B}_0$ и $R \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. В частности, $\mathbf{n} : |\mathbb{R}| \times \partial \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathcal{U}$ – поле вектора внешней нормали [157] к ее поверхности. Во избежание усложненных построений и обозначений, будем считать его существующим всюду $(t \in |\mathbb{R}|, \mathbf{R}_0 \in \partial \mathcal{B}_0)$ и при этом непрерывно-дифференцируемым в пределах конечного числа некоторых непересекающихся покрывающих подобластей.

Физический контакт в момент $t \in |\mathbb{R}|$ имеет место на подмножестве $\ell_0^p(t) \subset \ell_0^c(t)$, отвечающем действию прижимающих усилий:

$$\ell_0^p(t) = \left\{ \mathbf{R}_0 \in \ell_0^c(t) \mid (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n})(t, \mathbf{R}_0) < 0 \right\}. \quad (2.8)$$

Выделенная часть, в свою очередь, подразделяется на зоны $\ell_0^a(t) \subset \ell_0^p(t)$ – прилипания и $\ell_0^s(t) \subset \ell_0^p(t)$ – проскальзывания, в зависимости от режима реализации сил трения (конкретный вид задаваемых краевых условий приводится ниже после введения всех фрагментов, составляющих поверхность заготовки):

$$\ell_0^a(t) = \left\{ \mathbf{R}_0 \in \ell_0^p(t) \mid \|\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn})\|(t, \mathbf{R}_0) < p^t(t, \mathbf{R}_0) \right\}; \quad (2.9)$$

$$\ell_0^s(t) = \ell_0^p(t) \setminus \ell_0^a(t). \quad (2.10)$$

Здесь $p^t: |\mathbb{R}| \times \partial \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{R}^+$ – поле предельного касательного напряжения трения покоя, определяемое из закона Кулона–Зибеля:

$$p^t = \min \left\{ -\mu \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{n}, \tau^y \right\}, \quad (2.11)$$

где $\mu \in \mathbb{R}^+$ – коэффициент трения между поверхностями заготовки и инструмента; $\tau^y: |\mathbb{R}| \times \partial \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{R}^+$ – поле предела текучести материала заготовки на сдвиг. К вычислению последнего в общем случае необходимо привлекать отдельную подмодель ($t \in |\mathbb{R}|$, $\mathbf{R}_0 \in \partial \mathcal{B}_0$):

$$\tau^y(t, \mathbf{R}_0) = \tau^y(\mathcal{L}(t, \mathbf{R}_0)).$$

Для описания проскальзывания удобно ввести в рассмотрение поле $\mathbf{t}: |\mathbb{R}| \times \iota_0^s \rightarrow \mathcal{U}$ направляющего вектора скорости граничной точки заготовки относительно инструмента ($(t, \mathbf{R}) \in \iota_0^s$):

$$\mathbf{t} = \frac{\mathbf{v}^r}{\|\mathbf{v}^r\|}, \quad \mathbf{v}^r = \mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}^c, \quad (2.12)$$

областью определения которого является

$$\iota_0^s = \left\{ (t, \mathbf{R}_0) \mid t \in |\mathbb{R}|, \mathbf{R}_0 \in \ell_0^s(t) \right\}.$$

Наконец, участки поверхности, контактирующие в геометрическом, но не физическом смысле, составляют зону $\ell_0^f(t) \subset \partial \mathcal{B}_0(t)$ отлипания (принимаемую свободной от нагрузок):

$$\ell_0^f(t) = \ell_0^c(t) \setminus \ell_0^p(t). \quad (2.13)$$

Наряду с контактными, для задачи могут формулироваться кинематические, квазистатические, а также смешанные краевые условия. Получим запись последних в скоростном обобщенном виде, охватывающем часто встречающиеся на практике постановки (условия кинематического и квазистатического типов оказываются их частными случаями). Пусть $\{\bar{\ell}_0^{(m)}(t) \subset \partial \mathcal{B}_0\}$ – заданные в каждый

момент $t \in |\mathbb{R}|$ фрагменты поверхности заготовки с реализующимися в них при отсутствии геометрического контакта кинематическими и квазистатическими связями: $\bar{\ell}_0^{(m)}(t) \cap \bar{\ell}_0^{(n)}(t) = \emptyset$ при $m \neq n$ ($m, n \in \overline{0,3}$), где m обозначает количество кинематически фиксируемых степеней свободы (наложению каждой кинематической связи отвечает назначение некоторой проекции скорости, т.е. запрет соответствующей ей степени свободы). Случаю $m=0$, таким образом, отвечают квазистатические краевые условия, а $m=3$ – кинематические. Для формулируемой задачи принимается, что на поверхностных фрагментах геометрического контакта априори назначаемые связи не действуют, так что их реализация приходится на подмножества $\{\ell_0^{(m)} \subset \bar{\ell}_0^{(m)}\}$, определенные как ($m \in \overline{0,3}$)

$$\ell_0^{(m)}(t) = \bar{\ell}_0^{(m)}(t) \setminus \ell_0^c(t). \quad (2.14)$$

Без ограничения общности можно считать известными поля $\{\mathbf{b}^j : |\mathbb{R}| \times \partial \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathcal{U}\}$ таких ортогональных векторов ($j \in \overline{1,3}$), что при $t \in |\mathbb{R}|$ и $\mathbf{R}_0 \in \bar{\ell}_0^{(m)}(t)$, где $m \in \overline{0,3}$, априорные кинематические связи задаются вдоль $\{\mathbf{b}^k\}$, а квазистатические – вдоль $\{\mathbf{b}^l\}$ ($k \in \overline{1,m}$, $l \in \overline{m+1,3}$; запись подобного рода условий приведена далее). Введенный базис будем называть граничным. Во встречающихся на практике постановках в его состав обычно входят векторы базиса ЛСК (все или некоторые) и/или нормалей к поверхности деформируемого тела.

На введенных выше фрагментах (не обязательно односвязных) при $t \in \mathbb{R}^+$ записываются уравнения:

$$\mathbf{v} = \bar{\mathbf{v}}^c, \quad \mathbf{R}_0 \in \ell_0^a; \quad (2.15)$$

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \bar{\mathbf{v}}^c, \\ \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = p^t \mathbf{t}, \end{array} \right\} \mathbf{R}_0 \in \ell_0^s; \quad (2.16)$$

$$\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{R}_0 \in \ell_0^f; \quad (2.17)$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{b}^k \cdot \mathbf{v} &= \bar{v}^k, \quad k \in \overline{1, m}, \\ (\mathbf{n} \cdot \dot{\Sigma} - (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot (\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \Sigma) \cdot \mathbf{b}^l &= \bar{q}^l, \quad l \in \overline{m+1, 3}, \end{aligned} \right\} \mathbf{R}_0 \in \ell_0^{(m)}, \quad m \in \overline{0, 3}. \quad (2.18)$$

Здесь ставятся следующие краевые условия: (2.15) – прилипания; (2.16) – проскальзывания (с трением); (2.17) – отлипания; (2.18) – заданные смешанные (кинематические/квазистатические). Во втором уравнении системы (2.16) учитывается первое, из которого в рамках определения (2.12) следует, что $\mathbf{n} \cdot \mathbf{t} = 0$. Через $\{\bar{v}^j : \bar{v}_0^{(j)} \rightarrow \mathbb{R}\}$ и $\{\bar{q}^j : \bar{q}_0^{(j)} \rightarrow \mathbb{R}\}$ обозначены поля фиксируемых в граничном базисе компонент скоростей соответственно перемещений и изменений поверхностных распределенных сил, заданные на множествах ($j \in \overline{1, 3}$):

$$\bar{v}_0^{(j)} = \left\{ (t, \mathbf{R}_0) \mid t \in |\mathbb{R}|, \mathbf{R}_0 \in \bigcup_{m=j}^3 \bar{\ell}_0^{(m)}(t) \right\};$$

$$\bar{q}_0^{(j)} = \left\{ (t, \mathbf{R}_0) \mid t \in |\mathbb{R}|, \mathbf{R}_0 \in \bigcup_{m=0}^{j-1} \bar{\ell}_0^{(m)}(t) \right\}.$$

Особенностью приведенной постановки является присутствие в ней соотношений для напряжений скоростного и конечного типов. С точки зрения используемой формы уравнения равновесия первые из них являются естественными для задачи. При учете вторых возникает необходимость в специальной вычислительной алгоритмизации, обсуждаемой в дальнейшем изложении.

Начальные условия на макроуровне соответствуют $t = 0$ и имеют следующий вид:

$$\mathbf{r} = \mathbf{R}_0, \quad \mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0; \quad (2.19)$$

$$\nabla \cdot \Sigma = \mathbf{0}, \quad \mathbf{R}_0 \in \text{int } \mathcal{B}_0; \quad (2.20)$$

$$\mathbf{n} \cdot \Sigma \cdot \mathbf{b}^l = \bar{p}^l, \quad l \in \overline{m+1, 3}, \quad \mathbf{R}_0 \in \ell_0^{(m)}, \quad m \in \overline{0, 3}. \quad (2.21)$$

где $\{\bar{p}^j : \bigcup_{m=1}^{j-1} \bar{\ell}_0^{(m)}(0) \rightarrow \mathbb{R}\}$ – поля компонент исходных значений распределенных поверхностных сил ($j \in \overline{1, 3}$).

Равенства (2.16) и (2.17) можно рассматривать как интегральные аналоги уравнений (2.18) соответственно для случаев $k = 1$ и $k = 0$. Следует заметить, что базис, играющий роль граничного в соотношениях (2.16), и задаваемые вдоль его векторов компоненты при этом априори неизвестны. Кроме того, в их определении участвует не только геометрия поверхности заготовки, но и относительные скорости проскальзывания на границе с инструментом. В разделе 2.3 настоящей диссертации предлагается способ вычислительной реализации такого рода условий в рамках МКЭ, не требующий их предварительной аналитической переформулировки в скоростном виде.

Мезоуровень

Используемая в работе конститутивная модель представлена приведенной в данном подразделе системой, отнесенной к мезоскопическому уровню деформируемой заготовки. Материал последней предполагается состоящим из $N_c \in \mathbb{Z}^+$ пронумерованных по порядку однофазных кристаллитов. Принадлежность кристаллитов агрегату, ассоциируемому в момент $t \in |\mathbb{R}|$ с представительным объемом в материальной точке $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$, устанавливается наличием их номеров в соответствующем индексирующем множестве $\mathcal{N}(t, \mathbf{R}_0) \subset \overline{1, N_c}$.

Все записывается далее соотношения относятся к одному и тому же произвольному кристаллиту, номер $n \in \overline{1, N_c}$ которого в обозначениях опускается. На структурном уровне решетки эволюция его состояния отслеживается в ЛСК с помощью функций (от времени) вида $\mathbf{x}: |\mathbb{R}| \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}$, где $R \in \mathbb{Z}^+$, определяющими в момент $t \in |\mathbb{R}|$ следующие (тензорзначные того или иного ранга) характеристики (в том числе аналогичные введенным ранее макроскопическим): $\{\mathbf{k}_i(t) \in \mathcal{U}\}$ – ортогонального базиса ПСК ($i \in \overline{1, 3}$), связанной с элементами симметрии рассматриваемого типа решетки [39], $\boldsymbol{\sigma}(t) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ – напряжений Коши, $\boldsymbol{\lambda}(t) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ –

транспонированного градиента скорости перемещений, $\zeta^e(t), \zeta^{vp}(t) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ – соответственно упругой и вязкопластической аддитивных составляющих индифферентной меры скорости деформирования, $\mathbf{o}(t)$ – ориентации указанной ПСК относительно ЛСК, $\boldsymbol{\omega}(t) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ – спина этой ПСК, $\boldsymbol{\pi} \in \mathbb{E}_3^{(4)}$ – упругих модулей. При $t \in |\mathbb{R}|$ обозначенные величины вычисляются из системы (алгебраических и обыкновенных дифференциальных) уравнений:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\pi} : \zeta^e; \quad (2.22)$$

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{I} \times (\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1) : (\boldsymbol{\lambda} - \zeta^{vp}); \quad (2.23)$$

$$\zeta^e = \boldsymbol{\lambda} - \boldsymbol{\omega} - \zeta^{vp}; \quad (2.24)$$

$$\zeta^{vp} = \sum_{m=1}^{2N_{ss}} \dot{\gamma}_m \mathbf{b}_m \mathbf{n}_m; \quad (2.25)$$

$$\dot{\mathbf{o}} = \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{o}. \quad (2.26)$$

Здесь (2.22) и (2.24) – аналоги соотношений (2.2) и (2.3), используемых на макроуровне, (2.23) – вариант задания «решеточного» спина [39], (2.25) – соотношение, определяющее вязкопластическую составляющую меры скорости деформирования (см. ниже), (2.26) – интегрируемое уравнение для описания переориентации ПСК. В рамках формулируемой конститутивной модели основным механизмом неупругой деформации в кристаллите принимается скольжение краевых дислокаций. На структурном уровне $2N_{ss} \in \mathbb{N}$ систем скольжения, «удвоенных» по направлению движения дислокаций, в момент $t \in |\mathbb{R}|$ вводятся следующие характеристики, связываемые значениями с соответствующими функциями обозначенного выше вида ($m \in \overline{1, 2N_{ss}}$): $\{\dot{\gamma}_m \in |\mathbb{R}|\}$ – скорости сдвигов, $\{\tau_m, \tau_m^* \in \mathbb{R}\}$ – действующие и критические (для активации систем) касательные напряжения, $\{\mathbf{b}_m(t), \mathbf{n}_m(t) \in \mathcal{U}\}$ – направляющие векторы соответственно Бюргера и нормалей к плоскостям скольжения. Для данных величин при $t \in |\mathbb{R}|$ записывается подсистема уравнений ($m \in \overline{1, 2N_{ss}}$):

$$\dot{\gamma}_m = \dot{\gamma}^* \sqrt{\boldsymbol{\lambda} : \boldsymbol{\lambda}^\top} \left(\frac{\tau_m}{\tau_m^*} \right)^\nu \llbracket \tau_m \geq \tau_m^* \rrbracket; \quad (2.27)$$

$$\tau_m = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{b}_m \mathbf{n}_m; \quad (2.28)$$

$$\dot{\tau}_m^* = \sum_{p=1}^{2N_{ss}} h_{mp} \dot{\gamma}_p. \quad (2.29)$$

Материальными константами в модели являются: $\dot{\gamma}^* \in |\mathbb{R}|$ – относительная базовая скорость сдвига, $\nu \in |\mathbb{R}|$ – параметр скоростной чувствительности, $\{h_{mp} \in |\mathbb{R}|\}$ – коэффициенты упрочнения ($m, p \in \overline{1, 2N_{ss}}$). Помимо этого, $\{\mathbf{k}_i\}$, $\{\mathbf{b}_m, \mathbf{n}_m\}$ и $\boldsymbol{\pi}$ считаются постоянными и известными в ПСК ($i \in \overline{1, 3}, m \in \overline{1, 2N_{ss}}$). Данное обстоятельство можно выразить с помощью равенств:

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{o} \cdot \mathbf{l}_i, \quad i \in \overline{1, 3}; \quad (2.30)$$

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{o} * \boldsymbol{\pi}^\#; \quad (2.31)$$

$$\mathbf{b}_m \mathbf{n}_m = \mathbf{o} * (\mathbf{b}_m^\# \mathbf{n}_m^\#), \quad m \in \overline{1, 2N_{ss}}; \quad (2.32)$$

где $\{\mathbf{b}_m^\#, \mathbf{n}_m^\# \in \mathcal{U}\}$ и $\boldsymbol{\pi}^\# \in \mathbb{E}_3^{(4)}$ – соответственно направляющие векторы Бюргерса, нормалей к системам скольжения и тензор упругих модулей для кристаллита, занимающего фиксированную отсчетную ориентацию в ЛСК; «*» обозначает произведение Рэлея [57].

Начальные условия в конститутивной модели (2.22)-(2.32) имеют вид:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0}; \quad (2.33)$$

$$\mathbf{o} = \mathbf{o}_0; \quad (2.34)$$

$$\tau_m^* = \tau_{m0}^*, \quad m \in \overline{1, 2N_{ss}}. \quad (2.35)$$

Здесь $\{\tau_m^* \in \mathbb{R}\}$ и \mathbf{o}_0 – соответственно исходные критические касательные напряжения ($m \in \overline{1, 2N_{ss}}$) и ориентация ПСК рассматриваемого кристаллита. В численных расчетах такие величины, как правило, задаются случайно, путем разыгрывания требуемого закона распределения (например, установленного экспериментально или известного из литературных источников).

Взаимосвязь масштабных уровней

Реализация связей между макро- и мезоуровнем задачи предполагает передачу воздействий в каждый из кристаллитов, а также осреднение их откликов по соответствующим агрегатам, отнесенным к материальным точкам. В рамках используемой в работе модели указанные процедуры осуществляются в предположении расширенной гипотезы Фойгта об однородности градиента скорости деформирования в пределах любого отдельно взятого представительного объема поликристалла. Для функций $\{\mathbf{x}_n : |\mathbb{R}| \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}\}$, где $R \in \mathbb{N}$, воспроизводящих эволюцию некоторой характеристики кристаллитов с (постоянными) объемами $\{v_n \in \mathbb{R}^+\}$, осреднение « $\langle \cdot \rangle$ » формально определяет поле $\langle \mathbf{x} \rangle : |\mathbb{R}| \times \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}$ ее макроскопического эффективного аналога, а также функции $\{\Delta \mathbf{x}_n : |\mathbb{R}| \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}\}$ отклонений от среднего значения ($n \in \overline{1, N_c}$):

$$\langle \mathbf{x} \rangle(t, \mathbf{R}_0) = \left(\sum_{n \in \mathcal{I}(t, \mathbf{R}_0)} v_n \right)^{-1} \sum_{n \in \mathcal{I}(t, \mathbf{R}_0)} v_n \mathbf{x}_n(t);$$

$$\Delta \mathbf{x}_n(t) = \mathbf{x}_n(t) - \langle \mathbf{x} \rangle(t, \mathbf{R}_0), \quad n \in \mathcal{I}(t, \mathbf{R}_0).$$

С помощью введенных обозначений связь рассматриваемых масштабных уровней можно выразить следующим образом. При передаче кинематического воздействия (с «макро» на «мезо») принимается ($\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$, $n \in \mathcal{I}(t, \mathbf{R}_0)$)

$$\boldsymbol{\lambda}_n(t) = \nabla \mathbf{v}^\top(t, \mathbf{R}_0). \quad (2.36)$$

В свою очередь, получение механического отклика (с «мезо» на «макро»), осуществляется при $t \in |\mathbb{R}|$ и $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{B}_0$ в соответствии с равенствами:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle; \quad (2.37)$$

$$\boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle; \quad (2.38)$$

$$\boldsymbol{\Pi} = \langle \boldsymbol{\pi} \rangle; \quad (2.39)$$

$$\mathbf{Z}^{\text{vp}} = \langle \boldsymbol{\zeta}^{\text{vp}} \rangle + \boldsymbol{\Pi}^{\ominus 1} : \langle \Delta \boldsymbol{\pi} : \Delta \boldsymbol{\zeta}^{\text{vp}} + \Delta \boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \boldsymbol{\omega} - \Delta \boldsymbol{\omega} \cdot \Delta \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad (2.40)$$

где $\mathbf{\Pi}^{\ominus 1} \in \mathbb{E}_3^{(4)}$ обозначает обобщенно обратный [160] к $\mathbf{\Pi}$ тензор. Неаддитивная форма соотношения (2.40) возникает вследствие статистического согласования [39] условий (2.38) и (2.39) с требованием (2.37) при переходе от мезоскопического закона (2.22) к его макроскопическому аналогу (2.2) с учетом гипотезы (2.36). Перечисленные уравнения, таким образом, являются зависимыми – одно из них удовлетворяется автоматически при выполнении всех остальных. На рисунке 2.1 приведена схема организации вычислений в представленном выше варианте модели.

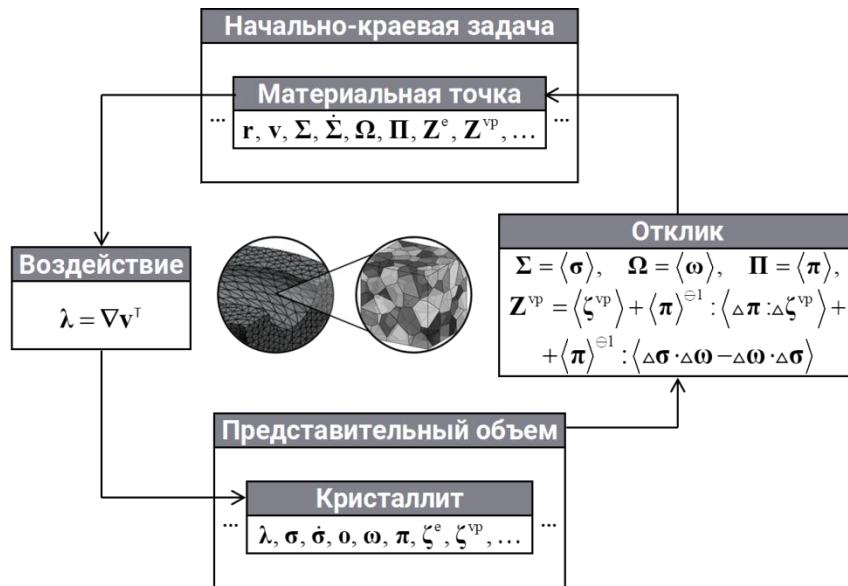


Рисунок 2.1. Взаимосвязь двух масштабных уровней статистической конститутивной модели для описания упруговязкопластического деформирования поликристаллического материала

Пусть некоторая характеристика решетки описывается измеримым распределением вида $\mathbf{x}: \mathbb{O}^+ \rightarrow \mathbb{E}_3^{(R)}$, где $R \in |\mathbb{Z}|$, устанавливающим ее значение $\mathbf{x}(\mathbf{O}) \in \mathbb{E}_3^{(R)}$ в зависимости от ориентации \mathbf{O} . Тогда для поликристалла с МРО Φ макроскопический эффективный аналог $\langle \mathbf{x}, \Phi \rangle \in \mathbb{E}_3^{(R)}$ такой характеристики может быть вычислен как

$$\langle \mathbf{x}, \Phi \rangle = \int_{\mathbb{O}^+} \mathbf{x} d\Phi.$$

Определенная данным равенством операция « $\langle \cdot, \cdot \rangle$ » в действительности представляет собой обобщение введенного выше осреднения. Пусть рассматривается агрегат из кристаллитов, занимающих $N \in \mathbb{Z}^+$ различных ориентаций $\{\mathbf{O}_n\}$, и $\{V_n \in \mathbb{R}^+\}$ – суммарные объемы решетки, которые на них приходятся ($n \in N$). В таком случае пары $\{(V_n, \mathbf{O}_n)\}$ индуцируют так называемую взвешенную эмпирическую МРО (ВЭМРО) Φ^e ($\varnothing \in \mathbb{O}^+$):

$$\Phi^e(\varnothing) = \left(\sum_{n=1}^N V_n \right)^{-1} \sum_{n=1}^N V_n \mathbf{O}_n \in \varnothing .$$

Ее основным свойством является

$$\langle \mathbf{x}, \Phi^e \rangle = \left(\sum_{n=1}^N V_n \right)^{-1} \sum_{n=1}^N V_n \mathbf{x}(\mathbf{O}_n),$$

т.е. представленная операция может использоваться и при определении осреднения в «дискретном» смысле. Здесь важно заметить, что осредняемая характеристика предполагается устанавливаемой исключительно по ориентации решетки. В рамках сформулированной конститутивной модели такими являются, например, тензор упругих констант и ориентационные диады систем скольжения, по существу являющиеся материальными параметрами. Для них требуемое соответствие задается равенствами (2.31) и (2.32). В общем же случае наблюдаемое значение характеристики не может быть ассоциировано с каким-то конкретным кристаллитом на основании одной только его ориентации, и тогда для осреднения информации о текстуре оказывается недостаточно. Приведенные выше соотношения справедливы в рамках теорий гомогенизации первого порядка (не учитывающих корреляции), и их приложениями ограничивается круг проблем, рассматриваемых в данной работе.

2.3. Конечно-элементная реализация контактных краевых условий

Пусть численное решение задачи (2.1)-(2.40) строится в скоростях на конечном наборе срезов по времени. Примем, что деформируемая заготовка дискретизируется лагранжевой конечно-элементной сеткой, состоящей из $P \in \mathbb{Z}^+$

узлов с неизменными порядковыми номерами. Во всех последующих рассуждениях рассматривается фиксированный временной срез, отвечающий некоторому моменту $t \in \mathbb{R}^+$. Для произвольной (скалярзначной) характеристики заготовки, в континуальной постановке задаваемой полем вида $x: |\mathbb{R}| \times \mathcal{Q}_0 \rightarrow \mathbb{R}$, где $\mathcal{Q}_0 \subset \mathcal{B}_0$, через $x_p \in \mathbb{R}$ обозначается величина ее конечно-элементной аппроксимации в точке, занимаемой узлом с номером $p \in \overline{1, P}$. При этом, если иное не оговорено отдельно, компоненты векторов и тензоров относятся к базису ЛСК.

Введем в рассмотрение вектор-строки $\{v_p, g_p \in \mathbb{R}^3\}$ компонент узловых скоростей соответственно перемещений и изменений сил ($p \in \overline{1, P}$). В рамках МКЭ связи между указанными величинами глобально описываются СЛАУ:

$$\mathbf{K} \mathbf{v}^T = \mathbf{g}^T. \quad (2.41)$$

Здесь: $\mathbf{v}, \mathbf{g} \in \mathbb{R}^{3P}$ – вектор-строки, собранные по правилу:

$$\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_P); \quad \mathbf{g} = (g_1, \dots, g_P);$$

$\mathbf{K} \in \mathbb{R}_{3P}^{3P}$ – так называемая матрица жесткости, допускающая блочное представление:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_{11} & \dots & \mathbf{K}_{P1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{K}_{1P} & \dots & \mathbf{K}_{PP} \end{bmatrix},$$

где $\{\mathbf{K}_{pq} \in \mathbb{R}_3^3\}$ – некоторые матрицы, совпадающие с нулевой для номеров узлов, не объединенных конечным элементом ($p, q \in \overline{1, P}$). Предполагается, что в аналогичной форме могут быть выражены все объекты, получаемые из введенных выше с помощью рассматриваемых далее преобразований.

Стандартный способ реализации краевых условий в рамках МКЭ состоит в модификации элементов СЛАУ (2.41), отнесенных к граничным узлам. Пусть совокупность всех таких узлов индексируется множеством ${}_p \subset \overline{1, P}$ их порядковых номеров. Обозначим $\{ {}_p^{(m)} \subset {}_p \}$ – индексирующие подмножества

узлов, расположенных на фрагментах с задаваемыми смешанными условиями различного типа, т.е. на $\{\bar{\ell}_0^{(m)}(t)\}$: по аналогии с континуальной постановкой, $\bar{p}^{(m)} \cap \bar{p}^{(n)} = \emptyset$ при $m \neq n$ ($m, n \in \overline{0,3}$). Предлагаемый подход к учету контакта соответствует типу «узел–поверхность», т.е. заготовка рассматривается как соприкасающаяся узлами своей сетки с границей инструмента (для которой допускается дискретизация плоскими фасетками). Таким образом, возможные контактные состояния с ее стороны требуют описания в терминах узлов и отнесенных к ним характеристик.

Геометрически контактирующие узлы, обозначаемые подмножеством $p^c \subset p$, могут быть установлены непосредственно из определения (2.6.a) для $\bar{\ell}_0^c(t)$:

$$p^c = \{ p \in p \mid T(t, r_p) = 0 \}. \quad (2.42)$$

Получение данного набора является непосредственным результатом поиска активных пар, дискретизирующих контакт заготовки и инструмента. Подобные и смежные технические вопросы (например, корректировка взаимопроникновения моделируемых тел) в настоящей работе не обсуждаются – основное внимание уделяется вычислительной реализации краевых соотношений.

Смешанные условия

Узлы с действительным выполнением смешанных условий указываются подмножествами $\{p^{(m)} \subset \bar{p}^{(m)}\}$, которые определяются по аналогии с формулой (2.14) для соответствующих $\{\bar{\ell}_0^{(m)}(t)\}$ ($m \in \overline{0,3}$):

$$p^{(m)} = \bar{p}^{(m)} \setminus p^c. \quad (2.43)$$

При использовании МКЭ равенства (2.18) для таких узлов переформулируются в виде:

$$\left. \begin{array}{l} b_p^k v_p^\top = \bar{v}_p^k, \quad k \in \overline{1, m}, \\ b_p^l g_p^\top = \bar{g}_p^l, \quad l \in \overline{m+1, 3} \end{array} \right\} \begin{array}{l} p \in p^{(m)}, \\ m \in \overline{0, 3}, \end{array} \quad (1.44)$$

где $\{\bar{g}_p^l \in \mathbb{R}\}$ – компоненты узловых скоростей изменения сил ($l \in \overline{m+1, 3}$, $m \in \overline{0, 3}$), эквивалентные заданным с помощью $\{\bar{q}^j\}$ скоростям изменения (распределенных) напряжений ($j \in \overline{1, 3}$). Для учета приведенных соотношений модифицируем СЛАУ (2.41), чтобы в связываемых ей вектор-строках индексруемые $p \in p^c$ блоки оказались записанными в соответствующем граничном базисе. Такое преобразование формально можно выразить следующим образом:

$$(\mathbf{O} \mathbf{K} \mathbf{O}^\top)(\mathbf{O} \mathbf{v}^\top) = \mathbf{O} \mathbf{g}^\top, \quad (1.45)$$

Здесь $\mathbf{O} \in \mathbb{R}_{3P}^{3P}$ – блочно-диагональная матрица:

$$\mathbf{O} = \begin{bmatrix} \mathbf{O}_1 & \dots & \Theta \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Theta & \dots & \mathbf{O}_P \end{bmatrix}, \quad (1.46)$$

в блоках которой $\Theta \in \mathbb{R}_3^3$ – нулевая матрица, а $\{\mathbf{O}_p \in \mathbb{R}_3^3\}$ – ортогональные матрицы ($p \in \overline{1, P}$), определенные как

$$O_p^{ij} = \begin{cases} b_p^{ji} & : p \in p^c; \\ \delta_p^{ij} & : p \notin p^c. \end{cases} \quad (2.47)$$

Для усиления ясности отметим, что b_p^{ji} , где $i, j \in \overline{1, 3}$ и $p \in p^c$, здесь следует понимать как i -компоненту b_p^j , т.е. как раз (i, j) -компоненту матрицы, переводящую вектор-столбцы из ЛСК в граничный базис p -го узла: в силу их ортонормированности, $\sum_{k=1}^3 b_p^{ik} b_p^{kj} = \delta^{ij}$ (т.е. соответствующая матрица ортогональна). Вектор-столбцы, отнесенные к внутренним узлам, при этом остаются без изменений (преобразуются единичной матрицей). Также, как нетрудно убедиться,

$$\mathbf{O}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{O}_1^\top & \dots & \Theta \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Theta & \dots & \mathbf{O}_P^\top \end{bmatrix} = \mathbf{O}^\top.$$

Произведя некоторые переобозначения в записи (1.45), можно получить:

$$\mathbf{K}' \mathbf{v}'^T = \mathbf{g}'^T \quad (2.48)$$

– эквивалент СЛАУ (2.41), который оказывается удобен для наложения узловых условий. Введенные выше матрица $\mathbf{K}' \in \mathbb{R}_{3p}^{3p}$ и вектор-строки $\mathbf{v}', \mathbf{g}' \in \mathbb{R}^{3p}$ связаны с исходными \mathbf{K} и \mathbf{v}, \mathbf{g} соотношениями (непосредственному определению в численной процедуре подлежат левые части):

$$\mathbf{g}' = \mathbf{g} \mathbf{O}^T; \quad \mathbf{K}' = \mathbf{O} \mathbf{K}' \mathbf{O}^T; \quad \mathbf{v} = \mathbf{v}' \mathbf{O}; \quad (2.49)$$

или – в блочном представлении ($p, q \in \overline{1, P}$):

$$\mathbf{g}'_p = \mathbf{g}_p \mathbf{O}_p^T; \quad \mathbf{K}'_{pq} = \mathbf{O}_p \mathbf{K}_{pq} \mathbf{O}_q^T; \quad \mathbf{v}_p = \mathbf{v}'_p \mathbf{O}_p; \quad (2.49.a)$$

в компонентном ($i, j \in \overline{1, 3}$):

$$\mathbf{g}'_p{}^i = \sum_{k=1}^3 \mathbf{O}_p^{ik} \mathbf{g}_p{}^k; \quad \mathbf{K}'_{pq}{}^{ij} = \sum_{k=1}^3 \sum_{l=1}^3 \mathbf{O}_p^{ik} \mathbf{O}_q^{il} \mathbf{K}_{pq}{}^{kl}; \quad \mathbf{v}_p{}^i = \sum_{k=1}^3 \mathbf{v}'_p{}^k \mathbf{O}_p^{ki}. \quad (2.49.б)$$

Перепишем условия (1.44) в следующем виде:

$$\left. \begin{array}{l} \mathbf{v}'_p{}^k = \overline{\mathbf{v}}_p{}^k, \quad k \in \overline{1, m}, \\ \mathbf{g}'_p{}^l = \overline{\mathbf{g}}_p{}^l, \quad l \in \overline{m+1, 3}, \end{array} \right\} \begin{array}{l} p \in \rho^{(m)}, \\ m \in \overline{0, 3}. \end{array} \quad (2.50)$$

Теперь, чтобы реализовать кинематическую связь вида $\mathbf{v}'_p{}^k = \overline{\mathbf{v}}_p{}^k$, где $k \in \overline{1, m}$, $p \in \rho^{(m)}$ и $m \in \overline{0, 3}$, достаточно обнулить недиагональные члены $(3p+k)$ -ой строки \mathbf{K}' (т.е. сохранив $\mathbf{K}'_{pp}{}^{ii}$), и задать $\mathbf{K}'_{pp}{}^{ii} \overline{\mathbf{v}}_p{}^i$ в качестве компоненты \mathbf{g}' на позиции с таким же порядковым номером. Ситуация с квазистатической связью типа $\mathbf{g}'_p{}^l = \overline{\mathbf{g}}_p{}^l$, где $l \in \overline{m+1, 3}$, $p \in \rho^{(m)}$ и $m \in \overline{0, 3}$, разрешается тривиально: соответствующее присваивание может быть выполнено в \mathbf{g}' без каких-либо модификаций \mathbf{K}' . Описанная здесь схема непосредственно применима в том числе к наложению условия (2.15) (прилипания) и первого равенства системы (2.16) (кинематика проскальзывания), поскольку их узловые формы записи отвечают по виду соотношениям (1.44). При этом в первом случае граничный и ЛСК базисы могут считаться совпадающими, т.е. переходы (2.49.a)/(2.49.б) для

рассматриваемых в нем узлов не требуются. Что касается второго равенства системы (2.16) (квазистатика проскальзывания) и условия (2.17) (свободной поверхности), процедуру их учета предлагается организовать посредством задания таких узловых скоростей изменения сил, которые бы обеспечивали получение требуемых значений для самих сил к началу следующего среза по времени. Построению подходящего алгоритма посвящен следующий подраздел.

Контактные условия

Прежде всего, переформулируем контактные условия в терминах узловых сил и скоростей перемещений. Для дальнейшего изложения ограничимся случаем представления области заготовки сеткой из $R \in \mathbb{Z}^+$ пронумерованных по порядку четырехузловых конечных элементов первого порядка с точками интегрирования, расположенными в их геометрических центрах. Отношения смежности между узлами, определяемые их принадлежностью к одному и тому же элементу, будем полагать неизменными. По аналогии с узловыми характеристиками, для поля вида $x: |\mathbb{R}| \times \mathcal{B}_0 \rightarrow \mathbb{R}$ через $x^{(r)} \in \mathbb{R}$ условимся обозначать значение его аппроксимации в точке интегрирования конечного элемента с номером $r \in \overline{1, R}$. Также введем в рассмотрение индексирующие множества $\{\mathcal{P}^{(r)} \subset \overline{1, P}\}$ для узлов, образующих указываемые элементы, и $\{\mathcal{R}_p \subset \overline{1, R}\}$ – для элементов, содержащих конкретизируемые узлы ($r \in \overline{1, R}$, $p \in \overline{1, P}$):

$$\mathcal{P}^{(r)} = \{ p \in \overline{1, P} \mid r \in \mathcal{R}_p \}; \quad \mathcal{R}_p = \{ r \in \overline{1, R} \mid p \in \mathcal{P}^{(r)} \}.$$

Базисные функции $\{e_p^{(r)}: \mathcal{E}^{(r)} \rightarrow \mathbb{R}\}$ представленного варианта МКЭ имеют вид ($r \in \overline{1, R}$, $p \in \mathcal{P}^{(r)}$):

$$e_p^{(r)}(\mathbf{r}) = e_p^{(r)0} + \sum_{i=1}^3 e_p^{(r)i} r^i, \quad (2.51)$$

где $\{e_p^{(r)i} \in \mathbb{R}\}$ – коэффициенты формы, определяемые из условия ($i \in \overline{0, 3}$):

$$e_p^{(r)}(\mathbf{r}_q) = \delta_{pq}. \quad (2.52)$$

Получим выражение для фиктивных узловых сил, задаваемых вектор-строками $\{f_p \in \mathbb{R}^3\}$, действие которых извне на конечные элементы создает в них предписанные напряжения, характеризуемые матрицами $\{\Sigma^{(r)} \in \mathbb{R}_3^3\}$ компонент ($p \in \overline{1, P}$, $r \in \overline{1, R}$). Для этого воспользуемся принципом равенства виртуальных мощностей. Пусть $\{V_p \in \mathbb{R}^3\}$ – вектор-строки виртуальных узловых скоростей, а $\{\Lambda^{(r)}\}$ – матрицы градиентов аппроксимирующего поля, совпадающего со значениями указанных скоростей в соответствующих узлах. Тогда необходимо

$$\sum_{p=1}^P f_p V_p^T = \sum_{r=1}^R \int_{\mathcal{E}^{(r)}} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \Sigma_r^{ij} \Lambda^{(r)ji} dV.$$

С учетом того, что для рассматриваемого порядка элементов ($i, j \in \overline{1, 3}$, $r \in \overline{1, R}$)

$$\Lambda^{(r)ij} = \sum_{p \in \mathcal{P}^{(r)}} e_p^{(r)i} V_p^j,$$

все подынтегральные выражения в записанном выше равенстве являются однородными. Отсюда в компонентах получаем:

$$\sum_{p=1}^P \sum_{i=1}^3 f_p^i V_p^i = \sum_{r=1}^R V^{(r)} \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \Sigma^{(r)ij} \sum_{p \in \mathcal{P}^{(r)}} e_p^{(r)j} V_p^i,$$

где $\{V^{(r)} = V(\mathcal{E}^{(r)}) \in \mathbb{R}^+\}$ – объемы элементов ($r \in \overline{1, R}$). Вспоминая о произвольности выбора $\{V_p^i\}$, из рассмотрения частных случаев заключаем ($i \in \overline{1, 3}$, $p \in \overline{1, P}$):

$$f_p^i = \sum_{r=1}^R \left[\left\| p \in \mathcal{P}^{(r)} \right\| V_r \sum_{j=1}^3 e_p^{(r)i} \Sigma^{(r)ij} \right]$$

или, после упрощения,

$$f_p^i = \sum_{r \in \mathcal{R}_p} V^{(r)} \sum_{j=1}^3 e_p^{(r)i} \Sigma^{(r)ij}. \quad (2.53)$$

Введем индексующие множества для узлов в различных состояниях контакта: $\mathcal{P}^p \subset \mathcal{P}^c$ – физически контактирующих, $\mathcal{P}^a \subset \mathcal{P}^p$ – «прилипающих», $\mathcal{P}^s \subset \mathcal{P}^p$ – «проскальзывающих», а также $\mathcal{P}^f \subset \mathcal{P}^c$ – «отлипающих», определяемые

в соответствии с формулами (2.8)–(2.10) и (2.13) для аналогичных $\ell_0^p(t)$, $\ell_0^a(t)$, $\ell_0^s(t)$ и $\ell_0^f(t)$:

$$p^p = \{ p \in p^c \mid n_p^c f_p^T > 0 \}; \quad (2.54)$$

$$p^a = \{ p \in p^p \mid f_p f_p^T - (n_p^c f_p^T)^2 < (f_p^t)^2 \}; \quad (2.55)$$

$$p^s = p^p \setminus p^a. \quad (2.56)$$

В приведенных соотношениях: $\{n_p^c \in \mathbb{R}^3\}$ – вектор-строки единичных внешних нормалей к поверхности инструмента, вычисленные в (геометрически контактирующих) узлах заготовки ($p \in p^c$); $f_p^t \in |\mathbb{R}|$ – предельные величины узловых касательных сил трения покоя ($p \in p^c$):

$$f_p^t = \min \{ \mu n_p^c f_p^T, f_p^y \}, \quad (2.57)$$

где, в свою очередь, $\{f_p^y \in |\mathbb{R}|\}$ – величины касательных узловых сил ($p \in p$), эффективно эквивалентных предельным напряжениям текучести на сдвиг, задаваемым τ^y . Для их установления предлагается эвристическая оценка:

$$f_p^y = \frac{\sum_{r \in \mathcal{R}_p} V^{(r)} \tau^{y(r)}}{\sum_{r \in \mathcal{R}_p} V^{(r)}} \sum_{q \in \mathcal{Q}_p} \llbracket 1 + n_p^c n^{(q)T} < \delta \rrbracket \frac{S^{(q)}}{3}. \quad (2.58)$$

Здесь для $Q \in \mathbb{N}$ пронумерованных по порядку граней конечных элементов обозначены ($q \in \overline{1, Q}$): $\{n^{(q)} \in \mathbb{R}^3\}$ – вектор-строки единичных нормалей, внешних по отношению к элементам, $\{S^{(q)} \in \mathbb{R}^+\}$ – их площади. Множества $\{\mathcal{Q}_p \subset \overline{1, Q}\}$ определены как номера граней, содержащих отмечаемые узлы ($p \in p$). Для вычисления величин $\{\tau^{y(r)} \in \mathbb{R}^+\}$ предполагается привлечение конститутивной модели ($r \in \overline{1, R}$). Соотношение (2.58), таким образом, представляет собой аппроксимированное предельное напряжение текучести, умноженное на эффективную площадь контакта узла. Малый параметр $\delta \in \mathbb{R}^+$ накладывает ограничение на максимальную разориентацию нормалей между поверхностью

инструмента и гранями элементов заготовки, учитываемых при расчете данной площади. Отметим, что оценка вкладов от различных граней может быть реализована и множеством других способов – например, по количеству геометрически контактирующих узлов.

Для записи всех требуемых условий необходимо также определить вектор-строки $\{t_p \in \mathbb{R}^3\}$ единичных направлений смещений узлов заготовки относительно инструмента ($p \in \mathcal{P}^s$):

$$t_p = \frac{v_p^{rt}}{\sqrt{v_p^{rt} v_p^{rtT}}}, \quad v_p^{rt} = v_p^r - (n_p^c v_p^{rT}) n_p^c, \quad v_p^r = v_p - \bar{v}_p^c, \quad (2.59)$$

где $\{\bar{v}_p^c \in \mathbb{R}^3\}$ – вектор-строки известных компонент скоростей поверхности инструмента, вычисленные в (проскальзывающих) узлах заготовки. Данные равенства есть дискретный аналог соотношения (2.12), модифицированный с целью обеспечения $n_p^c t_p^T = 0$ при $p \in \mathcal{P}^s$. Следует заметить, что указанная ортогональность является выражением условий непроницания, которые в любом случае предполагаются к внесению в глобальную СЛАУ и, таким образом, создают впечатление об избыточности произведенной модификации. Ее целесообразность обусловлена взаимозависимостями $\{t_p\}$ и $\{v\}$, не позволяющими выполнить упомянутые условия с приемлемой точностью. Наконец, введем в рассмотрение вектор-строки $\{b_p \in \mathbb{R}^3\}$ единичных бинормалей ($i \in \overline{1,3}, p \in \mathcal{P}^s$):

$$b_p^i = \sum_{j=1}^3 \sum_{k=1}^3 \varepsilon^{ijk} n_p^{cj} t_p^k, \quad (2.60)$$

где $\varepsilon^{ijk} = (i-j)(j-k)(k-i)/2$ – символ Леви-Чивиты при $i, j, k \in \overline{1,3}$.

Тройки $\{(n_p^c, t_p, b_p)\}$ образуют ортонормированные узловые базисы ($p \in \mathcal{P}^s$), используемые в роли граничных при записи условий (2.16) (проскальзывания). Обратим внимание, что в континуальной постановке в них фигурируют векторы нормалей к поверхности заготовки, а не инструмента: являясь почти всюду строго

противоположными друг другу, они оказываются взаимозаменяемыми с поправкой на знак. В рамках принятого подхода к реализации МКЭ контактирующими частями заготовки считаются узлы, в которых вектора нормалей в обычном смысле, вообще говоря, неопределимы. По этой причине во всех приводимых в работе узловых соотношениях присутствует вектор нормали именно к поверхности инструмента. Заметим, что такой вектор может быть вычислен всегда независимо от решения задачи. Впрочем, корректное численное моделирование контакта должно обеспечивать близость двух обозначенных типов нормалей, за исключением возможных мест, где формы рассматриваемых континуальных поверхностей имеют значительный излом. Итак, условия проскальзывания узлового типа имеют следующий вид ($p \in \rho^s$):

$$\mathbf{n}_p^c \mathbf{v}_p = \mathbf{n}_p^c \bar{\mathbf{v}}_p^c; \quad (2.61.a)$$

$$\mathbf{t}_p \mathbf{f}_p^\top = \mathbf{f}_p^t; \quad (2.61.б)$$

$$\mathbf{b}_p \mathbf{f}_p^\top = 0. \quad (2.61.в)$$

Предлагаемый подход к вычислительной реализации равенств (2.61.б) и (2.61.в) основывается на задании в скоростном виде согласованных с ними квазистатических и кинематических связей. Под согласованностью здесь понимается равенство численно проинтегрированных узловых сил требуемым значениям с точностью до величины, имеющей, как минимум, первый порядок малости по интервалу между последовательными временными срезами. В приводимых далее выражениях под $\bar{x} \in \mathbb{R}$ будем понимать величину произвольной характеристики $x \in \mathbb{R}$ на предыдущем срезе по времени (относительно текущего).

Зафиксируем произвольный узел с $p \in \rho^s$. Продифференцировав обе части соотношения (2.61.б) по времени, получим

$$\dot{\mathbf{t}}_p \mathbf{f}_p^\top + \mathbf{t}_p \dot{\mathbf{f}}_p^\top = \dot{\mathbf{f}}_p^t.$$

В записанном равенстве воспользуемся разностными аппроксимациями для некоторых производных:

$$t_p \dot{f}_p^\top = \frac{f_p^t - \bar{f}_p^t}{t - \bar{t}} - \frac{t_p - \bar{t}_p}{t - \bar{t}} f_p^\top + O(t - \bar{t}).$$

Здесь и далее $O(t - \bar{t})$ обозначает произвольную величину, имеющую порядок малости по $t - \bar{t}$ не ниже первого. С учетом того, что

$$f_p = \bar{f}_p + O(t - \bar{t}),$$

приходим к соотношению:

$$t_p \dot{f}_p^\top = \frac{f_p^t - \bar{f}_p^t}{t - \bar{t}} - \frac{t_p - \bar{t}_p}{t - \bar{t}} \bar{f}_p^\top + O(t - \bar{t}),$$

в котором примем

$$\bar{t}_p \bar{f}_p^\top = \bar{f}_p^t$$

в качестве условия (2.61.б), удовлетворенного на предыдущем срезе. В результате получим:

$$t_p \dot{f}_p^\top = \frac{f_p^t - t_p \bar{f}_p^\top}{t - \bar{t}} + O(t - \bar{t}).$$

Проведя аналогичные рассуждения с соотношением (2.61.в), рассматриваемые уравнения можно переписать, пренебрегая $O(t - \bar{t})$, следующим образом ($p \in \rho^s$):

$$t_p g_p^\top = \frac{f_p^t - t_p \bar{f}_p^\top}{t - \bar{t}};$$

$$b_p g_p^\top = -\frac{b_p \bar{f}_p^\top}{t - \bar{t}}.$$

Заметим, что в похожем виде оказываются представленными и соотношения для отлипающих узлов ($j \in \overline{1,3}$, $p \in \rho^f$):

$$b_p^j g_p^\top = -\frac{b_p^j \bar{f}_p^\top}{t - \bar{t}}.$$

С учетом вышеизложенного, приведем окончательную узловую форму контактных условий в компонентах ($p \in \rho^c$):

$$v_p^k = \bar{v}_p^{ck}, \quad k \in \overline{1,3}, \quad p \in \rho^a; \quad (2.62)$$

$$v_p^n = v_p^{cn}, \quad g_p^t = \frac{f_p^t - \bar{f}_p^t}{t - \bar{t}}, \quad g_p^b = -\frac{\bar{f}_p^b}{t - \bar{t}}, \quad p \in \mathcal{P}^s; \quad (2.63)$$

$$g_p^l = -\frac{\bar{f}_p^l}{t - \bar{t}}, \quad l \in \overline{1,3}, \quad p \in \mathcal{P}^f. \quad (2.64)$$

Здесь через x_p^n , x_p^t и x_p^b , где $p \in \mathcal{P}^s$, обозначены величины проекций вектор-строки x_p вдоль n_p^c , t_p и b_p соответственно (т.е. компоненты ее переопределения в специальном граничном базисе p -го узла). Система (2.50), (2.62)-(2.64) задает краевые условия для всех поверхностных узлов заготовки. Учет ее соотношений упомянутым ранее способом приводит к модифицированной СЛАУ:

$$\bar{K}' v'^T = \bar{g}'^T, \quad (2.65)$$

части которой можно формально определить записанными далее выражениями. Напомним, что величина $\bar{g}_p^{ii} \in \mathbb{R}$ считается заданной при $i \in \overline{m+1,3}$, $p \in \mathcal{P}^{(m)}$ и $m \in \overline{0,3}$ (чем и обосновываются выбранные обозначения). В остальных случаях принимается:

$$\bar{g}_p^{ii} = \begin{cases} K_{pp}^{ii} \bar{v}_p^{ci} : p \in \mathcal{P}^a; \\ K_{pp}^{ii} \bar{v}_p^{ci} : b_p^i = n_p^c, \quad p \in \mathcal{P}^s; \\ \frac{f_p^t - \bar{f}_p^{ti}}{t - \bar{t}} : b_p^i = t_p, \quad p \in \mathcal{P}^s; \\ \frac{-\bar{f}_p^{ri}}{t - \bar{t}} : b_p^i = b_p, \quad p \in \mathcal{P}^s; \\ \frac{-\bar{f}_p^i}{t - \bar{t}} : p \in \mathcal{P}^f; \\ K_{pp}^{ii} \bar{v}_p^i : i \in \overline{1,m}, \quad p \in \mathcal{P}^{(m)}, \quad m \in \overline{0,3}. \end{cases} \quad (2.66)$$

Для матрицы жесткости при этом:

$$\bar{K}_{pq}^{ij} = \begin{cases} \delta_{pq} \delta^{ij} K_{pp}^{ii} : p \in \mathcal{P}^a; \\ K_{pq}^{ij} : p \in \mathcal{P}^f; \\ \delta_{pq} \delta^{ij} K_{pp}^{ii} : i \in \overline{1,m}, \quad p \in \mathcal{P}^{(m)}, \quad m \in \overline{0,3} \text{ ИЛИ } p \in \mathcal{P}^s, \quad b_p^i = n_p^c; \\ K_{pq}^{ij} : i \in \overline{m+1,3}, \quad p \in \mathcal{P}^{(m)}, \quad m \in \overline{0,3} \text{ ИЛИ } p \in \mathcal{P}^s, \quad b_p^i \neq n_p^c. \end{cases} \quad (2.67)$$

Как видно из определения (2.59), граничные базисы проскальзывающих узлов, используемые при формулировке соответствующих условий, уже зависят от решения задачи на том же временном срезе. В этом смысле на введенную выше O следует смотреть как на вычисляемое в v значение $O(v)$ некоторого нелинейного отображения $O: \mathbb{R}^{3P} \rightarrow \mathbb{R}_{3P}^{3P}$. В силу соотношений (2.49) аналогичные зависимости имеют место также для \bar{K}' и \bar{g}' : $\bar{K}': \mathbb{R}^{3P} \rightarrow \mathbb{R}_{3P}^{3P}$ и $\bar{g}': \mathbb{R}^{3P} \rightarrow \mathbb{R}^{3P}$ соответственно. Принимая во внимание СЛАУ (2.65), можно заключить, что v должна являться корнем следующего уравнения (неподвижной точкой нелинейного оператора, представленного в его правой части):

$$v = (O^T \bar{K}'^{-1} \bar{g}')(v). \quad (2.68)$$

Нахождение этого корня является заключительной стадией численного решения задачи на рассматриваемом временном срезе. Для реализации соответствующей процедуры могут использоваться различные схемы, например, итерационные, основанные на принципе сжимающих отображений [13]. Заметим, что вычисление правой части уравнения (2.68) на каждой итерации будет сводиться к решению СЛАУ (2.65), однако само итерирование потребуется только при наличии контакта типа проскальзывания (в изотропном приближении предела текучести).

Содержание основной части настоящего раздела резюмируется таблицами 2.1 и 2.2, в которых сопоставляются определения краевых условий для континуальной постановки рассматриваемой задачи и их вычислительной реализации в рамках предлагаемого подхода на базе МКЭ. Приведенные соотношения записаны для произвольного момента $t \in \mathbb{R}^+$. Обозначения аргументов полей в условных выражениях для нахождения поверхностных фрагментов пропущены.

Таблица 2.1. Поверхностные фрагменты в континуальном описании краевых условий различного типа и их представление в виде множеств номеров узлов в МКЭ

Тип	Поверхностный фрагмент	Множество номеров узлов
-----	------------------------	-------------------------

Геометрический контакт	$\ell_0^c = \{ \mathbf{R}_0 \in \partial \mathcal{B}_0 \mid \mathbf{r} \in \partial \mathcal{F} \}$	$\mathcal{P}^c = \{ p \in \mathcal{P} \mid T(t, \mathbf{r}_p) = 0 \}$
- Физический контакт	$\ell_0^p = \{ \mathbf{R}_0 \in \ell_0^c \mid \mathbf{n} \cdot \Sigma \cdot \mathbf{n} < 0 \}$	$\mathcal{P}^p = \{ p \in \mathcal{P}^c \mid \mathbf{n}_p^c \mathbf{f}_p^T > 0 \}$
-- Прилипание	$\ell_0^a = \{ \mathbf{R}_0 \in \ell_0^p \mid \ \mathbf{n} \cdot \Sigma \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{nn})\ < p^t \}$	$\mathcal{P}^a = \{ p \in \mathcal{P}^p \mid \mathbf{f}_p \mathbf{f}_p^T - (\mathbf{n}_p^c \mathbf{f}_p^T)^2 < (f_p^t)^2 \}$
-- Скольжение	$\ell_0^s = \ell_0^p \setminus \ell_0^a$	$\mathcal{P}^s = \mathcal{P}^p \setminus \mathcal{P}^a$
- Отлипание	$\ell_0^f = \ell_0^c \setminus \ell_0^p$	$\mathcal{P}^f = \mathcal{P}^c \setminus \mathcal{P}^p$
Смешанное, $m \in \overline{0, 3}$	$\ell_0^{(m)} = \overline{\ell_0^{(m)}} \setminus \ell_0^c$	$\mathcal{P}^{(m)} = \overline{\mathcal{P}^{(m)}} \setminus \mathcal{P}^c$

Таблица 2.2. Континуальное описание краевых условий различного типа и их реализация в МКЭ

Тип	Краевое условие	Реализация в МКЭ
Прилипание	$\mathbf{v} = \overline{\mathbf{v}}^c, \mathbf{R}_0 \in \ell_0^a$	$\mathbf{v}_p = \overline{\mathbf{v}}_p^c, p \in \mathcal{P}^a$
Скольжение	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{n} \cdot \overline{\mathbf{v}}^c \\ \mathbf{n} \cdot \Sigma = p^t \mathbf{t} \end{array} \right\} \mathbf{R}_0 \in \ell_0^s$	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{n}_p^c \mathbf{v}_p^T = \mathbf{n}_p^c \overline{\mathbf{v}}_p^{cT} \\ \mathbf{t}_p \mathbf{g}_p^T = (\mathbf{f}_p^t - \mathbf{t}_p \overline{\mathbf{f}}_p^T) / (t - \overline{t}) \\ \mathbf{b}_p \mathbf{g}_p^T = -\mathbf{b}_p \overline{\mathbf{f}}_p^T / (t - \overline{t}) \end{array} \right\} p \in \mathcal{P}^s$
Отлипание	$\mathbf{n} \cdot \Sigma = \mathbf{0}, \mathbf{R}_0 \in \ell_0^f$	$\mathbf{g}_p = -\overline{\mathbf{f}}_p / (t - \overline{t}), p \in \mathcal{P}^f$
Смешанное, $m \in \overline{0, 3}$	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{b}^k \cdot \mathbf{v} = \overline{\mathbf{v}}^k, k \in \overline{1, m} \\ (\mathbf{n} \cdot \dot{\Sigma} - (\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot (\nabla \mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) \cdot \Sigma) \cdot \mathbf{b}^l = \overline{\mathbf{q}}^l, \\ l \in \overline{m+1, 3} \end{array} \right\} \mathbf{R}_0 \in \ell_0^{(m)}$	$\left. \begin{array}{l} \mathbf{b}_p^k \mathbf{v}_p^T = \overline{\mathbf{v}}_p^k, k \in \overline{1, m} \\ \mathbf{b}_p^l \mathbf{g}_p^T = \overline{\mathbf{g}}_p^l, l \in \overline{m+1, 3} \end{array} \right\} p \in \mathcal{P}^{(m)}$

Объединяя все изложенные в разделе приемы, можно построить следующий вариант процедуры решения задачи, сформулированный в виде алгоритма 2.1. В описании приведено краткое содержание ключевых этапов и даны (в качестве напоминаний) указания на способ их реализации.

Алгоритм 2.1. Решение МКЭ контактной начально-краевой задачи на временном срезе в рамках подхода «узел–поверхность»

Параметры и предопределенные процедуры

- конститутивная модель материала заготовки;
- δ – мера максимальной разориентации нормалей между поверхностью инструмента и гранями конечных элементов заготовки, учитываемых при вычислении эффективной площади узлового контакта;
- схема итерирования и критерий сходимости для нахождения вектор-строки решения нелинейного операторного уравнения.

Данные с предыдущего среза

- \bar{t} – момент времени;
- параметры внутреннего состояния материала заготовки;
- $\{\bar{r}_p\}$ – вектор-строки координат узлов сетки заготовки ($p \in \overline{1, P}$);
- \bar{v} – вектор-строка узловых скоростей перемещений сетки заготовки (полученная в качестве решения на момент \bar{t}).

Данные для текущего среза

- t – момент времени;
- $\{\bar{p}^{(m)}\}$ – индексирующие множества узлов заготовки, при отсутствии геометрического контакта находящихся под действием различных смешанных условий ($m \in \overline{0, 3}$);
- $\{b_p^j\}$ – векторы узловых ортонормированных граничных базисов для задания смешанных условий ($j \in \overline{1, 3}$, $p \in \bar{p}^{(m)}$, $m \in \overline{0, 3}$);
- $\{\bar{v}_p^k, \bar{g}_p^l\}$ – фиксируемые относительно граничных базисов компоненты узловых скоростей соответственно перемещений и изменений сил сетки заготовки ($k \in \overline{1, m}$, $l \in \overline{m+1, 3}$, $p \in \bar{p}^{(m)}$, $m \in \overline{0, 3}$).
- конфигурация поверхности инструмента и ее мгновенное движение.

Основная процедура

1. Актуализировать вектор-строки $\{r_p\}$ координат узлов ($p \in \overline{1, P}$), объемы $\{V^{(r)}\}$ конечных элементов ($r \in \overline{1, R}$) и коэффициенты $\{e_p^{(r)i}\}$ функций формы ($i \in \overline{0, 3}$, $p \in \mathcal{P}^{(r)}$, $r \in \overline{1, R}$).
2. Вычислить матрицы $\{\Sigma^{(r)}\}$ компонент напряжений в точках интегрирования конечных элементов ($r \in \overline{1, R}$), используя конститутивную модель материала. Вычислить матрицу К жесткости.
3. Определить индексирующее множество p^c геометрически контактирующих узлов, используя соотношение (2.42).
4. Вычислить вектор-строки $\{f_p\}$ узловых сил ($p \in p$), эквивалентных действующим напряжениям, используя соотношение (2.53).
5. Определить индексирующие множества узлов: p^a – прилипающих, p^s – проскальзывающих; p^f – отлипающих; $p^{(m)}$ – различных смешанных ($m \in \overline{0, 3}$); используя соотношения (2.54)-(2.56), (2.43).
6. Принять $v \leftarrow \bar{v}$ в качестве приближения вектор-строки узловых скоростей перемещений (решения задачи на текущем временном срезе).
7. Обновить вектор-строки $\{t_p, b_p\}$ граничных базисов проскальзывающих узлов ($p \in p^s$) и зависимую от них матрицу О глобальной замены базисов, используя соотношения (2.59), (2.60) и (2.47), полагая $(b_p^1, b_p^2, b_p^3) \leftarrow (n_p^c, t_p, b_p)$.
8. Обновить вектор-строку \bar{g}' и матрицу \bar{K}' жесткости, модифицированные для учета краевых условий, используя соотношения (2.66) и (2.67).
9. Решить СЛАУ (2.65) относительно вектор-строки v' и обновить v , используя третье равенство из соотношений (2.49).
10. Сопоставить v и \bar{v} , используя критерий сходимости. В случае...
 - 10.1. ...выполнения: принять v в качестве решения на текущем временном срезе.
 - 10.2. ...невыполнения: принять $\bar{v} \leftarrow v$; обновить v , используя схему итерирования; перейти к шагу 7.

Заметим, если на итерируемых шагах алгоритма 2.1 наблюдаются малые относительные узловые скорости проскальзывания, то вектор-строки их единичных направлений векторы могут испытывать трудности со сходимостью вследствие деления в соотношениях (2.59) на близкое к нулю число. Технически, в таких «медленных» узлах в предельном случае оказываются выполненными условия прилипания, т.е. равенства (2.62). Для их реализации построение специального граничного базиса не требуется, так что указанная проблема разрешается перераспределением узлов по соответствующим индексирующим множествам между итерациями. Другим возможным приемом является корректировка определения (2.59), при которой результатом вычисления необходимой вектор-строки для околонулевого знаменателя будет некоторое априори задаваемое значение.

2.4. Статистическая реализация начальных условий

Напомним, что статистические многоуровневые конститутивные модели поликристаллов оперируют с явным представлением текстуры – в виде выборки ориентаций кристаллических решеток для каждого представительного объема. В этой связи расчеты процессов обработки материалов с исходной текстурой требуют генерации начальных ориентаций, распределение которых в совокупности удовлетворяет известным данным. Настоящий раздел посвящен формулировке подходящих для такой цели алгоритмов, применимых к случаю, когда подобные данные предоставляются на полюсных фигурах.

Фундаментальное уравнение текстурного анализа

ФРН $R\phi: \mathcal{S}^2 \rightarrow |\mathbb{R}|$ является характеристикой текстуры, полностью задаваемой ФРО ϕ [62]. По определению, если $\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathcal{U}$ – случайно выбранные по равномерному закону векторы в КСК и ЛСК соответственно, то значение $R\phi(\mathbf{k}, \mathbf{l}) \in |\mathbb{R}|$ показывает плотность распределения вероятности совпадения

данных векторов по всему рассматриваемому поликристаллу. Таким образом, $R\phi$ есть результат осреднения ϕ по всем ориентациям $\mathbf{O} \in \mathbb{O}^+$, для которых $\mathbf{O} \cdot \mathbf{k} = 1$. Это можно записать как ($\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathcal{S}$)

$$R\phi(\mathbf{k}, \mathbf{l}) = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \phi(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{k}, \mathbf{l})) d\alpha = \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \phi(\mathbf{R}(\alpha, \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}(\mathbf{k}, \mathbf{l})) d\alpha. \quad (2.69)$$

Используемый здесь множитель $\pi^{-2}/8$ обеспечивает следующую нормировку:

$$\int_{\mathbf{l} \in \mathcal{S}} R\phi(\mathbf{k}, \mathbf{l}) dS(\mathbf{l}) = 1, \quad \mathbf{k} \in \mathcal{U};$$

$$\int_{\mathbf{k} \in \mathcal{S}} R\phi(\mathbf{k}, \mathbf{l}) dS(\mathbf{k}) = 1, \quad \mathbf{l} \in \mathcal{U}.$$

Отметим, что определение (2.69) иногда называют сферическим преобразованием Радона [64, 137, 144, 145] (примененным к ϕ).

Стандартные дифракционные методы экспериментальных исследований текстуры не различают положительные и отрицательные кристаллографические направления – на полюсных фигурах соответствующие им векторы проецируются в одну точку. Эмпирически измеримыми с данной позиции оказываются значения полюсных плотностей [62] – осредненных по $\pm\mathbf{k}$ (т.е. симметризованных) ФРН с некоторыми фиксированными аргументами. В том случае, когда фиксируется первый (\mathbf{k}), говорят о прямой полюсной плотности (ППП), а если второй (\mathbf{l}) – обратной (ОПП). Их изображениями являются прямые и обратные полюсные фигуры (ППФ и ОПФ), получаемые стереографическим проецированием направлений-аргументов на выбранные плоскости образца материала и кристаллической решетки соответственно. В последующих теоретических выкладках в целях более лаконичного описания рассмотрение ограничивается случаем конкретно ППП/ППФ. Однако все приводимые построения допускают распространение и на ОПП/ОПФ, а также их произвольные комбинации.

Пусть для исследуемого поликристалла получено $K \in \mathbb{N}$ ППФ для направлений $\{\pm\mathbf{k}^{(k)}\}$, и $\{d^{(k)} : \mathcal{U} \rightarrow |\mathbb{R}|\}$ – соответствующие им ППП ($k \in \overline{1, K}$). Тогда, с учетом сказанного выше ($k \in \overline{1, K}$, $\mathbf{l} \in \mathcal{S}$),

$$d^{(k)}(\mathbf{l}) = \frac{1}{2} \left(\mathbb{R} \phi(\mathbf{k}^{(k)}, \mathbf{l}) + \mathbb{R} \phi(-\mathbf{k}^{(k)}, \mathbf{l}) \right). \quad (2.70)$$

Записанное соотношение, которое следует рассматривать как уравнение (интегральное типа Фредгольма) относительно ϕ , играет важную роль в текстурном анализе. Совместно с определением (2.69), система подобных уравнений дает возможность восстановить ФРО по набору известных ППП. Важно отметить, что задача такого восстановления принципиально не является корректной [116]. На основе дифракционного эксперимента ФРО может быть оценена лишь с точностью до «антисимметричного» слагаемого, проекция которого на полюсную фигуру тождественно равна нулю. С другой стороны, неточности в измерении и представлении соответствующих плотностей могут приводить к переопределению (появлению конфликтующих уравнений) обозначенной системы. Поставленную задачу, таким образом, целесообразно решать с привлечением регуляризующих приемов.

Восстановление ФРО в подходе Монте-Карло

При выводе основных соотношений предлагаемого способа обращения полюсных фигур условимся считать все ФРО и ФРН ограниченными и суммируемыми. Получим статистическую интерпретацию уравнений (2.69) и (2.70), допускающую непосредственную вычислительную реализацию на основе подхода Монте-Карло. Для этого перепишем определение (2.69) в следующем формальном виде, справедливом для всех практически целесообразных ϕ :

$$\mathbb{R} \phi(\mathbf{k}, \mathbf{l}) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\int_{\mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon)} \phi dU}{U(\mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon))}. \quad (2.71)$$

Здесь через $\mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon) \subset \mathbb{O}^+$ обозначено множество всех ориентаций КСК относительно ЛСК, при которых угол между соответственно определенными в них векторами $\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathcal{K}$ при совмещении оказывается меньше $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$.

$$\mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon) = \left\{ \mathbf{O} \in \mathbb{O}^+ \mid \mathbf{l} \cdot \mathbf{O} \cdot \mathbf{k} > \cos \varepsilon \right\}. \quad (2.72)$$

Суть произведенной модификации состоит в замене интеграла по кривой (одномерному многообразию) на интеграл по ε -трубке (трехмерному многообразию), окружающей данную кривую. Такой переход дает возможность оперировать с понятием плотности в статистическом смысле. Заметим, что для произвольных поворотов \mathbf{R} и \mathbf{S} выполнено ($\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathcal{S}$)

$$\mathcal{O}(\mathbf{R} \cdot \mathbf{k}, \mathbf{S} \cdot \mathbf{l}, \varepsilon) = \mathbf{R}^\top \cdot \mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon) \cdot \mathbf{S}^\top$$

и, следовательно,

$$U(\mathcal{O}(\mathbf{R} \cdot \mathbf{k}, \mathbf{S} \cdot \mathbf{l}, \varepsilon)) = U(\mathbf{R}^\top \cdot \mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon) \cdot \mathbf{S}^\top) = U(\mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon)).$$

Другими словами, однородная МРО (инвариантный ориентационный объем) ε -трубки зависит исключительно от ε . Рассматривая удобные частные случаи, можно заключить ($\mathbf{k}, \mathbf{l} \in \mathcal{U}$, $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$):

$$U(\mathcal{O}(\mathbf{k}, \mathbf{l}, \varepsilon)) = \frac{1 - \cos \varepsilon}{2}. \quad (2.73)$$

В дальнейшем изложении ε полагается малой константной формулируемого метода, значение которой связывается с точностью определения ППП. Ориентируясь на формулу (2.70), введем соответствующие им функции $\{D^{(k)} \phi: \mathcal{S} \rightarrow \overline{|\mathbb{R}|}\}$ как ($k \in \overline{1, K}$, $\mathbf{l} \in \mathcal{U}$)

$$\begin{aligned} (1 - \cos \varepsilon) D^{(k)} \phi(\mathbf{l}) &= \int_{\mathcal{O}(\mathbf{k}^{(k)}, \mathbf{l}, \varepsilon)} \phi dU + \int_{\mathcal{O}(-\mathbf{k}^{(k)}, \mathbf{l}, \varepsilon)} \phi dU = \\ &= \int_{\mathbf{O} \in \mathbb{O}^+} \mathbb{I}[|\mathbf{l} \cdot \mathbf{O} \cdot \mathbf{k}| > \cos \varepsilon] \phi(\mathbf{O}) dU(\mathbf{O}). \end{aligned} \quad (2.74)$$

Ввиду замечаний, относящихся к некорректности исходной постановки, задачу восстановления ϕ предлагается свести к среднеквадратичной минимизации разностей $\{D^{(k)} \phi - d^{(k)}\}$ по сумме гильбертовых функциональных норм ($k \in \overline{1, K}$). Пусть \mathcal{Q} – множество ФРО, принимаемых в качестве допустимых. Тогда необходимо найти такую $\hat{\phi} \in \mathcal{Q}$, для которой:

$$Q(\hat{\phi}) = \min_{\phi \in \mathcal{Q}} Q(\phi); \quad (2.75)$$

$$Q(\phi) = \sum_{k=1}^K \int_{\mathcal{S}} \left((D^{(k)} \phi)^2 - 2d^{(k)} D^{(k)} \phi \right) dS. \quad (2.76)$$

Последующие рассуждения опираются на подход Монте-Карло, обоснование аппарата которого дается предельными теоремами теории вероятностей. Введем пространство Ω элементарных исходов с выделенной на нем сигма-алгеброй \mathcal{W} случайных событий и заданной вероятностной мерой $\text{Pr} : \mathcal{W} \rightarrow [0,1]$. Под случайными величинами [58] условимся понимать измеримые отображения из Ω в соответствующие области значений. При этом сами значения, отвечающие конкретным элементарным исходам, будем называть реализациями. Для случайных чисел $X, Y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ определим: $\langle X \rangle$ – математическое ожидание X ; $\langle X|Y \rangle$ – условное математическое ожидание X относительно Y . В теоретических построениях, связанных со сходимостью, ограничимся рассмотрением последовательных пределов по вероятности, каждый из которых условимся обозначать операцией plim .

Пусть $\{\mathbf{L}_l : \Omega \rightarrow \mathcal{U}\}$ – некоторая последовательность случайных направляющих векторов, распределенных по равномерному закону ($l \in \mathbb{Z}^+$, $u \in \mathcal{U}$):

$$\text{Pr}(\mathbf{L}_l \in u) = \frac{S(u)}{4\pi}. \quad (2.77)$$

Исходя из смысла математического ожидания, правую часть соотношения (2.76) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned} Q(\phi) &= \sum_{k=1}^K \left\langle \left(D^k \phi(\mathbf{L}_l) \right)^2 - 2d^k(\mathbf{L}_l) D^k \phi(\mathbf{L}_l) \right\rangle = \\ &= \text{plim}_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_{k=1}^K \sum_{l=1}^L \left(\left(D^k \phi(\mathbf{L}_l) \right)^2 - 2d^k(\mathbf{L}_l) D^k \phi(\mathbf{L}_l) \right). \end{aligned} \quad (2.78)$$

Предельный переход, выполненный в последнем равенстве, является выражением закона больших чисел (ЗБЧ) в формулировке Чебышева. Пусть, далее, $\{\mathbf{O}_m : \Omega \rightarrow \mathcal{O}^+\}$ – последовательность равномерно распределенных случайных ориентаций ($m \in \mathbb{N}$, $\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$):

$$\Pr(\mathbf{O}_m \in \mathcal{O}) = U(\mathcal{O}). \quad (2.79)$$

Введем в рассмотрение зависимые от них (случайные) числа $\{D_{lm}^{(k)} : \Omega^2 \rightarrow \{0,1\}\}$ и $\{d_l^{(k)}, \phi_m : \Omega \rightarrow |\mathbb{R}|\}$, определенные как ($k \in \overline{1, K}$, $l, m \in \mathbb{Z}^+$)

$$D_{lm}^{(k)} = \left[\left[\left| \mathbf{L}_l \cdot \mathbf{O}_m \cdot \mathbf{k}^{(k)} \right| > \cos \varepsilon \right] \right]; \quad (2.80)$$

$$d_l^{(k)} = d^{(k)}(\mathbf{L}_l); \quad (2.81)$$

$$\phi_m = \phi(\mathbf{O}_m). \quad (2.82)$$

Тогда внутри формулы (2.78) получим:

$$D^{(k)} \phi(\mathbf{L}_l) = \left\langle D_{l1}^{(k)} \phi_1 \middle| \mathbf{L}_l \right\rangle = \text{plim}_{M \rightarrow \infty} \frac{\sum_{m=1}^M D_{lm}^{(k)} \phi_m}{M(1 - \cos \varepsilon)}, \quad (2.83)$$

Зафиксируем первые $L \in \mathbb{Z}^+$ элементов из $\{\mathbf{L}_l\}$ и первые $M \in \mathbb{Z}^+$ элементов из $\{\mathbf{O}_m\}$. Сгруппируем соответствующие им $\{D_{lm}^{(k)}, d_l^{(k)}, \phi_m\}$ в матрицу $D \in \mathbb{R}_{KL}^M$ и вектор-строки $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^{KL}$, $\phi \in \mathbb{R}^M$ по правилам ($k \in \overline{1, K}$, $l \in \overline{1, L}$, $m \in \overline{1, M}$):

$$D = \begin{bmatrix} D_{11}^{(1)} & \dots & D_{1M}^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{L1}^{(1)} & \dots & D_{LM}^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{11}^{(K)} & \dots & D_{1M}^{(K)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{L1}^{(K)} & \dots & D_{LM}^{(K)} \end{bmatrix}; \quad \mathbf{d}^T = \begin{bmatrix} d_1^{(1)} \\ \vdots \\ d_L^{(1)} \\ \vdots \\ d_1^{(K)} \\ \vdots \\ d_L^{(K)} \end{bmatrix}; \quad \phi^T = \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \vdots \\ \phi_M \end{bmatrix}. \quad (2.84)$$

С использованием введенных обозначений можно получить следующий конечный дискретный аналог задачи восстановления ФРО. Пусть $\mathcal{Q}^e \subset \mathbb{R}^M$ – множество допустимых вектор строк, отвечающее ранее выбранному \mathcal{Q} . Необходимо найти такую $\hat{\phi}^e \in \mathcal{Q}^e$, что

$$Q^e(\hat{\phi}^e) = \min_{\phi \in \mathcal{Q}^e} Q^e(\phi); \quad (2.85)$$

$$Q^e(\phi) = \phi \frac{D^T D}{M(1 - \cos \varepsilon)} \phi^T - 2 \mathbf{d} D \phi^T. \quad (2.86)$$

Решение задачи (2.85)–(2.86) определяет вектор-строку $\hat{d}^e \in \mathbb{R}^{KL}$ воспроизводимых значений ППП:

$$\hat{d}^e = \frac{D\hat{\phi}^e}{M(1 - \cos \varepsilon)}. \quad (2.87)$$

Ее отклонение от известного d представляет собой оценку невязки восстановления ФРО, минимизированную по гильбертовой (евклидовой) норме на \mathbb{R}^{KL} . Отметим, что при $\mathcal{Q}^e = |\mathbb{R}|^M$ здесь решается классическая задача квадратичного программирования с ограничением на неотрицательность искомых переменных.

Отследив ход изложенных выше рассуждений, для МРО $\phi \in \mathcal{Q}$ и вектор-строки $\phi \in \mathcal{Q}^e$, связанных соотношением (2.82), заключаем:

$$\text{plim}_{L \rightarrow \infty} \text{plim}_{M \rightarrow \infty} \frac{Q^e(\phi)}{LM(1 - \cos \varepsilon)} = Q(\phi). \quad (2.88)$$

В этом смысле на постановку (2.85)–(2.86) можно смотреть как на статистическое приближение задачи (2.75)–(2.76). Компоненты $\hat{\phi}^e$ индуцируют так называемую взвешенную ЭМРО (ВЭМРО) $\hat{\Phi}^{we}(\mathcal{O})$ ($\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$):

$$\hat{\Phi}^{we}(\mathcal{O}) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \hat{\phi}_m^e \mathbf{O}_m \in \mathcal{O}, \quad (2.89)$$

значениями которой являются оценки соответствующих значений действительной МРО. Их поведение при $M \rightarrow \infty$ представляет собой отдельный вопрос, исследование которого выходит за рамки настоящей работы. Ограничимся лишь комментарием о том, что для любой гипотетической МРО Φ , имеющей ФРО ϕ , величина (2.89), где $\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$, дает состоятельную оценку для $\Phi(\mathcal{O})$ при $\{\hat{\phi}_m^e = \phi(\mathbf{O}_m)\}$, как следует из ЗБЧ Чебышева ($m \in \overline{1, M}$).

Описанная выше процедура восстанавливает ФРО локально в отдельных точках. Каждая точка при этом соответствует реализации случайной равномерно распределенной ориентации, которая, таким образом, «взвешивается» с оценкой соответствующего значения этой ФРО. Взвешенную выборку подобного типа и

формирующие ее элементы далее будем называть вспомогательными. По существу, их роль состоит в дискретизации ориентационного пространства, так или иначе предполагаемой практически всеми численными методами. Однако в рассматриваемом случае использования подхода Монте–Карло ее результат оказывается недетерминированным.

Теоретически возможной является ситуация, когда среди случайно генерируемых ориентаций возникают такие, которые не попадают ни в одну из существующих ε -трубок. Для реализации подобной ситуации необходимо, чтобы сеть из данных трубок не покрывала ориентационное пространство полностью, поэтому описываемый случай маловероятен при больших L . Компоненты ϕ , соответствующие указанным ориентациям, не влияют на (минимизируемую) величину (2.86), поскольку, как следует из определения (2.80), отвечающие им столбцы в D оказываются тождественно равными нулю. Фактически, для восстановления подобных значений ФРО не обнаруживается никаких данных. Формальный способ устранения обозначенной проблемы, приемлемый при автоматизации процедуры решения, состоит в обнулении таких переменных с последующим исключением из задачи (2.85)–(2.86).

Вариант метода с одной случайной выборкой

Можно обратить внимание, что $\{\mathbf{O}_m\}$ уже сами по себе должны породить случайные равномерно распределенные единичные векторы ($m \in \overline{1, M}$). Однако допустимость их использования вместо $\{\mathbf{L}_l\}$ при восстановлении ФРО изложенным выше способом, строго говоря, не следует непосредственно из классических ЗБЧ ($l \in \overline{1, L}$). Это связано с тем, что соответствующим образом переопределенные слагаемые в правой части равенства (2.86) перестают быть независимыми и одинаково распределенными. Впрочем, как будет показано, данное обстоятельство не нарушает сходимости, аналогичную соотношению (2.88), по крайней мере, в рассмотренном далее случае.

Каждая ППП, вообще говоря, может быть дискретизирована своим собственным набором случайных единичных векторов. Пусть на эти роли выбраны $\{\mathbf{L}_l^{(k)} : \Omega \rightarrow \mathcal{U}\}$, определенные как ($k \in \overline{1, K}$, $l \in \mathbb{N}$)

$$\mathbf{L}_l^{(k)} = \mathbf{O}_l \cdot \mathbf{k}^{(k)}.$$

Равномерность их распределения конструктивно выводится из следующих соображений. Зафиксируем произвольно множество $u \in \mathcal{U}$ направлений и поворот \mathbf{R} . Тогда, введя формальные обозначения $\{\mathcal{O}^{(k)}(u) \subset \mathbb{O}^+\}$ для следующих подмножеств ориентаций ($k \in \overline{1, K}$, $l \in \mathbb{Z}^+$):

$$\mathcal{O}^{(k)}(u) = \left\{ \mathbf{O} \in \mathbb{O}^+ \mid \mathbf{O} \cdot \mathbf{k}^{(k)} \in u \right\},$$

можно записать:

$$\Pr(\mathbf{L}_l^{(k)} \in \mathbf{R} \cdot u) = \Pr(\mathbf{R}^\top \cdot \mathbf{O}_l \cdot \mathbf{k}^{(k)} \in u) = \Pr(\mathbf{R}^\top \cdot \mathbf{O}_l \in \mathcal{O}^{(k)}(u)) = \Pr(\mathbf{O}_l \in \mathbf{R} \cdot \mathcal{O}^{(k)}(u)),$$

где для последнего выражения, с учетом равномерности распределения всех $\{\mathbf{O}_l\}$, справедливо

$$\Pr(\mathbf{O}_l \in \mathbf{R} \cdot \mathcal{O}^{(k)}(u)) = U(\mathbf{R} \cdot \mathcal{O}^{(k)}(u)) = U(\mathcal{O}^{(k)}(u)).$$

Здесь $\{\mathcal{O}^{(k)}(u)\}$ не зависят от \mathbf{R} , а следовательно ($k \in \overline{1, K}$),

$$\Pr(\mathbf{L}^{(k)} \in \mathbf{R} \cdot u) = \Pr(\mathbf{L}^{(k)} \in u) = 4\pi S(u),$$

что совпадает по виду с законом (2.77) и доказывает требуемую равномерность.

Взяв за основу определения (2.80), (2.81) и положив в них $\{\mathbf{L}_l \leftarrow \mathbf{L}_l^{(k)}\}$, введем случайные числа $\{\tilde{D}_{lm}^{(k)} : \Omega^2 \rightarrow \{0,1\}\}$ и $\{\tilde{d}_l^{(k)} : \Omega \rightarrow |\mathbb{R}|\}$ как ($k \in \overline{1, K}$, $l, m \in \mathbb{Z}^+$)

$$\tilde{D}_{lm}^k = \left\| \arccos \left| \mathbf{k}^{(k)} \cdot \mathbf{O}_l^\top \cdot \mathbf{O}_m \cdot \mathbf{k}^{(k)} \right| < \varepsilon \right\|; \quad (2.90)$$

$$\tilde{d}_l^{(k)} = d^{(k)}(\mathbf{O}_l \cdot \mathbf{k}^{(k)}). \quad (2.91)$$

Примем для рассматриваемой модификации $L \leftarrow M$ и сгруппируем $\{\tilde{D}_{lm}^{(k)}, \tilde{d}_l^{(k)}\}$ в матрицу $\tilde{\mathbf{D}} \in \mathbb{R}_{KM}^M$ и вектор-строку $\tilde{\mathbf{d}} \in \mathbb{R}^{KM}$ по аналогии с правилами

(2.84), полагая $(D, d) \leftarrow (\tilde{D}, \tilde{d})$. В этом случае приходим к задаче поиска такой $\hat{\phi}^e \in \mathcal{Q}^e$, для которой

$$\tilde{Q}^e(\hat{\phi}^e) = \min_{\phi \in \mathcal{Q}^e} \tilde{Q}^e(\phi), \quad (2.92)$$

$$\tilde{Q}^e(\phi) = \phi \frac{\tilde{D}^T \tilde{D}}{M(1 - \cos \varepsilon)} \phi^T - 2\tilde{d} \tilde{D} \phi^T. \quad (2.93)$$

Покажем, что в полученной постановке имеет место сходимость, подобная соотношению (2.88). А именно, для произвольной МРО $\phi \in \mathcal{Q}$ и вектор-строки $\phi \in \mathcal{Q}^e$, удовлетворяющих равенству (2.82), выполнено:

$$\text{plim}_{M \rightarrow \infty} \frac{\tilde{Q}^e(\phi)}{M^2(1 - \cos \varepsilon)} = Q(\phi). \quad (2.94)$$

Достаточно установить справедливость следующих предельных переходов, соответствующих двум слагаемым под каждым из интегралов в формуле (2.76) ($k \in \overline{1, K}$):

$$\text{plim}_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M^2} \sum_{l=1}^M \sum_{m=1}^M \tilde{d}_l^{(k)} \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m = \langle \tilde{d}_1^{(k)} \tilde{D}_{12}^{(k)} \phi_2 \rangle; \quad (2.95)$$

$$\text{plim}_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M^3} \sum_{l=1}^M \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M \phi_m \tilde{D}_{lm}^{(k)} \tilde{D}_{ln}^{(k)} \phi_n = \langle \tilde{D}_{12}^{(k)} \phi_2 \rangle^2. \quad (2.96)$$

Для левой части равенства (2.95) имеем ($k \in \overline{1, K}$):

$$\frac{1}{M^2} \sum_{l=1}^M \sum_{m=1}^M \tilde{d}_l^{(k)} \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m = \frac{2 \sum_{m=1}^M \tilde{d}_m^{(k)} \phi_m}{M^2(1 - \cos \varepsilon)} + \frac{2}{M^2} \sum_{l=2}^M \sum_{m=1}^{l-1} \tilde{d}_l^{(k)} \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m. \quad (2.97)$$

В записанном выражении присутствуют две суммы случайных величин, причем каждая из них по отдельности состоит из попарно независимых и одинаково распределенных слагаемых. Для первой суммы обнаруживается сходимость по вероятности к нулю, а для второй, содержащей $M^2/2 - M/2$ членов – к правой части соотношения (2.95), что и подтверждает его справедливость.

В случае равенства (2.96) доказательство получается аналогичным, но разложение на требуемые суммы попарно независимых компонент принимает несколько более сложный вид:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{M^3} \sum_{l=1}^M \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m \tilde{D}_{ln}^{(k)} \phi_n &= \frac{1}{M^3} \sum_{l=1}^M \sum_{m=1}^M \tilde{D}_{lm}^{(k)2} \phi_m^2 + \frac{2}{M^3} \sum_{l=1}^M \sum_{m=2}^M \sum_{n=1}^{m-1} \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m \tilde{D}_{ln}^{(k)} \phi_n = \\
&= \frac{1}{M^3} \sum_{l=1}^M \sum_{m=1}^M \tilde{D}_{lm}^{(k)2} \phi_m^2 + \frac{8 \sum_{m=2}^M \sum_{n=1}^{m-1} \phi_m \tilde{D}_{mn}^{(k)} \phi_n}{M^3 (1 - \cos \varepsilon)} + \\
&+ \frac{2}{M^3} \sum_{m=2}^M \sum_{n=2}^{m-1} \sum_{l=1}^{m-1} \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m \tilde{D}_{ln}^{(k)} \phi_n + \frac{2}{M^3} \sum_{m=2}^M \sum_{n=2}^{m-1} \sum_{l=1}^{m-1} \tilde{D}_{lm}^{(k)} \phi_m \tilde{D}_{ln}^{(k)} \phi_n.
\end{aligned} \tag{2.98}$$

Ненулевыми в пределе по вероятности здесь оказываются только последние две суммы, содержащие в совокупности $M^3/2 + 3M^2/2 - M$ слагаемых.

Таким образом, имеет место сходимость (2.94).

Заметим, что при решении задачи (2.92), (2.93) удается достоверно избежать обозначенной выше проблемы пустых ε -трубок. Каждый столбец \tilde{D} независимо от ε содержит, по крайней мере, K гарантированно отличных от нуля компонент. Следующий алгоритм 2.2 описывает реализацию рассмотренного здесь варианта процедуры восстановления ФРО. В качестве общей рекомендации по выбору значений ε и M можно указать на необходимость их согласования для обеспечения статистически представительного (достаточного для введения плотности) среднего количества ориентаций в каждой трубке. Как следует из соотношения (2.73), это число равно $M(1 - \cos \varepsilon)/2$.

Алгоритм 2.2. Оценка значений ФРО по вычислимым ППП в подходе Монте-Карло

Входные данные

- $\{d^{(k)}\}$ – ППП (т.е. функции, позволяющие вычислять их значение в каждой требуемой точке; $k \in \overline{1, K}$);
- ε – радиус ориентационной трубки, используемой для осреднения значений ФРО;
- M – объем генерируемой вспомогательной выборки ориентаций;
- \mathcal{O}^c – допустимое множество вектор-строк оценок значений ФРО на вспомогательных ориентациях.

Основная процедура

1. Сгенерировать выборку реализаций $\{\mathbf{o}_m\}$ случайной ориентации \mathbf{O}_1 , распределенной по

(равномерному) закону (2.79) ($m \in \overline{1, M}$).

2. Вычислить реализации матрицы \tilde{D} , вектор-строки \tilde{d} и зависимо от них целевого критерия \tilde{Q}^e , используя соотношения (2.90), (2.91), (2.84) и (2.93), полагая $\{\mathbf{O}_m \leftarrow \mathbf{o}_m\}$ и $(D, d) \leftarrow (\tilde{D}, \tilde{d})$.

3. Решить уравнение (2.92) относительно вектор-строки $\hat{\phi}^e$, приняв ее компоненты в качестве оценок значений ФРО на вспомогательных ориентациях.

Выходные данные

– $\{(\mathbf{o}_m, \hat{\phi}_m^e)\}$ – вспомогательные ориентации, взвешенные с оценками значений ФРО ($m \in \overline{1, M}$).

Случайная весовая селекция с повторениями

Результатом работы алгоритма 2.2 является вспомогательная выборка, т.е. набор взвешенных равномерно распределенных ориентаций. Такой объект может рассматриваться в качестве генеральной совокупности для разыгрывания элементов, подчиненных ВЭМРО (2.89). С этой целью каждой вспомогательной ориентации достаточно приписать вероятность реализации, пропорциональную ее весовому коэффициенту.

Более подробно: пусть $\{I_n : \Omega \rightarrow \overline{1, M}\}$ – независимые одинаково распределенные случайные индексы (дискретные величины), вероятности которых определены как ($n \in \mathbb{Z}^+$)

$$\Pr(I_n = m) = \frac{\hat{\phi}_m^e}{\sum_{p=1}^M \hat{\phi}_p^e}. \quad (2.99)$$

Тогда для соответствующей ВЭМРО (2.89) справедливо ($\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$)

$$\frac{\hat{\Phi}^{we}(\mathcal{O})}{\sum_{m=1}^M \hat{\phi}_m^e} = \sum_{m=1}^M \Pr(I_1 = m) \mathbf{O}_m \in \mathcal{O},$$

где в правой части по определению математического ожидания

$$\sum_{m=1}^M \Pr(I_1 = m) \mathbf{O}_m \in \mathcal{O} = \langle \mathbb{I}[\mathbf{O}_{I_1} \in \mathcal{O}] \rangle,$$

и, следовательно, на основании ЗБЧ Чебышева:

$$\frac{\hat{\Phi}^{we}(\mathcal{O})}{\sum_{m=1}^M \hat{\phi}_m^e} = \text{plim}_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{I}[\mathbf{O}_{I_n} \in \mathcal{O}]. \quad (2.100)$$

В силу условия нормировки МРО/ФРО знаменатель слева в записанном соотношении при $M \rightarrow \infty$ по вероятности ожидаемо стремится к 1 (вообще говоря, строгое равенство можно включить в состав ограничений на оценки значений восстанавливаемой ФРО – приведенные выше комментарии о состоятельности будут иметь место и в этом случае). Выражение справа под пределом есть не что иное, как построенная на $\{\mathbf{O}_{I_n}\}$ эмпирическая МРО (ЭМРО) $\Phi^e : \mathcal{O}^+ \rightarrow [0,1]$ – при фиксированных первых $N \in \mathbb{Z}^+$ индексов из $\{I_n\}$ ($n \in \overline{1, N}$, $\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$):

$$\hat{\Phi}^e(\mathcal{O}) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \mathbb{I}[\mathbf{O}_{I_n} \in \mathcal{O}]. \quad (2.101)$$

Таким образом, соотношение (2.100) выражает эквивалентность ВЭМРО (2.89) и ЭМРО (2.101) в вероятностном пределе, что служит теоретическим обоснованием рассмотренного способа получения ориентаций с требуемым распределением по вспомогательной выборке. Очевидно, данный подход применим и в случае заранее известной (вычислимой в любой точке) ФРО – в роли необходимых весовых коэффициентов при этом следует использовать непосредственно ее значения. Независимо от того, как именно установлены указанные коэффициенты, схема разыгрывания по ним случайных распределений воспроизводится следующим алгоритмом 2.3.

Алгоритм 2.3. Случайная весовая селекция с повторениями (СВСП) из вспомогательной выборки

Входные данные

- $\{(\mathbf{O}_m, \hat{\phi}_m^e)\}$ – вспомогательные ориентации, взвешенные со значениями ФРО (или их оценками; $m \in \overline{1, M}$);
- N – объем генерируемой выборки случайных ориентаций.

Основная процедура

1. Сгенерировать выборку независимых повторяемых реализаций $\{i_n\}$ случайного индекса

I_1 , распределенного по закону (2.99) ($n \in \overline{1, N}$).

2. Принять $\{\mathbf{o}_i\}$ в качестве элементов, подчиненных заданной ФРО ($n \in \overline{1, N}$).

Выходные данные

– $\{\mathbf{o}_i\}$ – ориентации, статистически воспроизводящие требуемое распределение ($n \in \overline{1, N}$).

Некоторые примеры

Для демонстрации работы сформулированных выше алгоритмов был решен ряд специальных прикладных задач. Полученные результаты представлены далее в данном подразделе. В части примеров рассматривались модельные ФРО, конструируемые посредством симметрического осреднения [6] специального однопараметрического семейства плотностей $\phi: \mathbb{R}^+ \times \mathbb{O}^+ \rightarrow |\mathbb{R}|$ Мизеса-Фишера [116]:

$$\phi(\kappa, \mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u})) = \exp(\kappa \cos \alpha - \nu(\kappa)) \quad \mathbf{R}(\alpha, \mathbf{u}) \in \mathcal{R} .$$

Здесь $\kappa \in \mathbb{R}^+$ – параметр, определяющий степень локализации распределения (чем выше значение, тем сильнее локализация); $\nu(\kappa) \in \mathbb{R}^+$ – величина, подбираемая из условия нормировки ФРО. Для практически целесообразного κ , сосредотачивающего подавляющую долю ориентаций внутри \mathcal{R} , значение последней с высокой точностью может быть вычислено как

$$\nu(\kappa) = \ln(I_0(\kappa) - I_1(\kappa)),$$

где I_0 и I_1 – соответственно пронумерованные модифицированные функции Бесселя первого рода.

На рисунке 2.2.а изображена вспомогательная выборка из $M = 10^4$ ориентаций, интенсивности точек которых характеризуют значения модельной ФРО при $\kappa = 30$. Для данного распределения 95% ориентаций локализуется условием $\omega \leq 29.7^\circ$ (99% – $\omega \leq 36.0^\circ$). Соответствующая область представляет собой метрический шар и составляет 17.5% (31.0%) от \mathcal{R} (в терминах однородной МРО); в рассмотренном случае в нее попали 1 722 (3 112) вспомогательных ориентаций, т.е. 17.2% (31.1%) от общего числа. Преимущественно именно из

таких элементов происходит СВСП. Пример типичной генерируемой в результате подвыборки объема $N = 10^3$ демонстрируется на рисунке 2.2.б, где интенсивностям точек отвечают их повторения. Здесь и далее в подразделе подписи x , y и z обозначают оси направлений вдоль \mathbf{l}_1 , \mathbf{l}_2 и \mathbf{l}_3 соответственно.

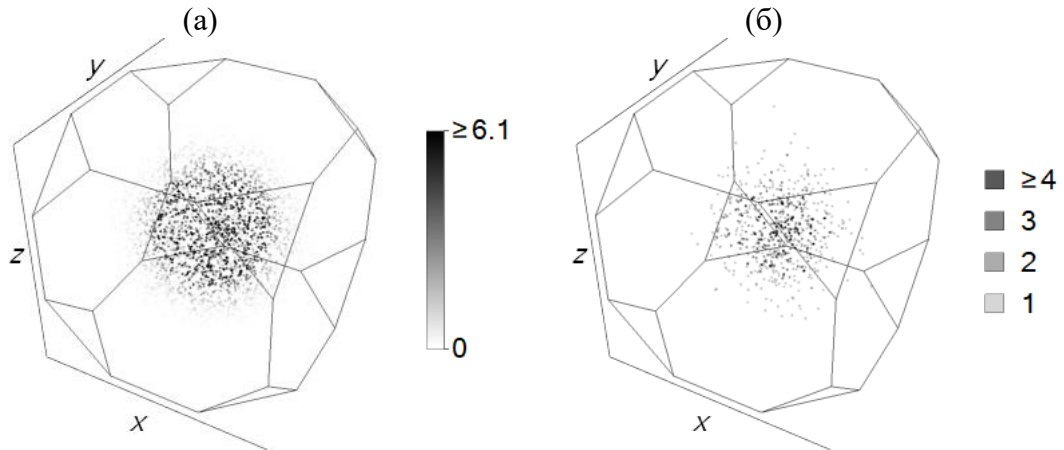


Рисунок 2.2. Значения заданной ФРО на вспомогательной выборке (а) и реализации, сгенерированные СВСП (б)

Статистически исследована точность восстановления параметров модельных ФРО по реализациям, получаемым с помощью СВСП из различных вспомогательных выборок. Результаты приведены на рисунке 2.3.а для некоторых значений κ и M . В зависимости от N , представляющего рассмотренный объем генерируемых подвыборок, построены эмпирические 95%-доверительные интервалы для 200 оценок κ методом максимального правдоподобия [58]. Отдельному испытанию отвечала собственная реализация вспомогательной выборки, объем $M = M(\kappa)$ которой назначался так, чтобы обеспечить неизменность ожидаемого числа ориентаций в метрическом шаре, локализирующем 95% соответствующего κ распределения. Подобное условие адаптирует статистическую плотность дискретизации ориентационного пространства под характерный масштаб неоднородности. Из анализа доверительных интервалов следует вполне естественный вывод о возрастании точности оценок с увеличением N . Абсолютная точность с ростом κ при фиксированном N при этом снижается, но в относительной шкале остается без изменений. На рисунке

2.3.б для рассмотренных значений κ и M изображены зависимости от N среднего числа повторений в генерируемых подвыборках. На практике величину такой статистики желательно обеспечивать близкой к 1. Существенно большие значения свидетельствуют о недостаточной представительности вспомогательной выборки для покрытия ориентационного пространства под разыгрываемое распределение.

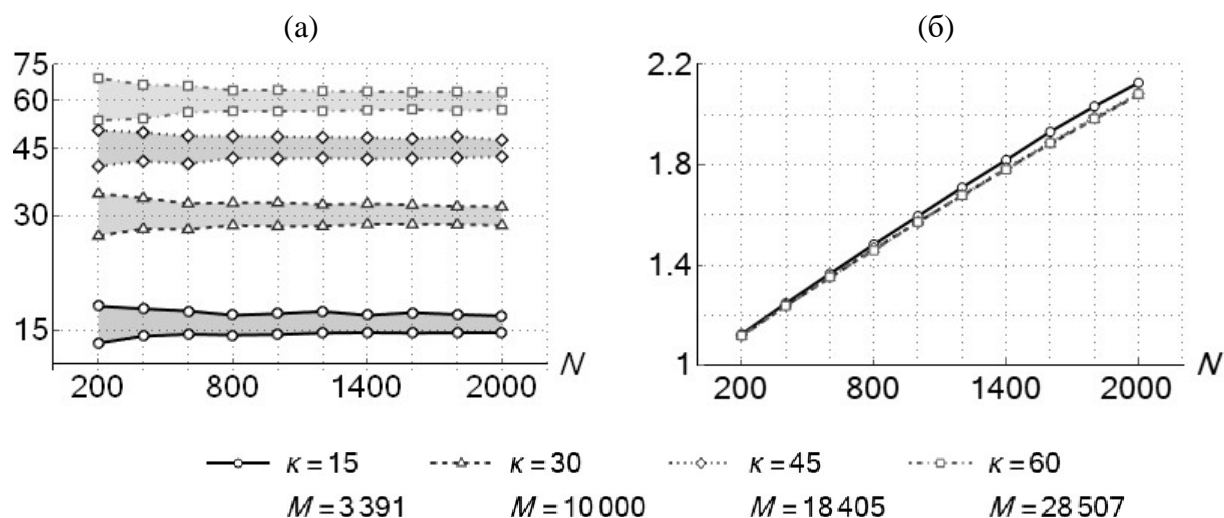


Рисунок 2.3. Точности оценок максимального правдоподобия параметра модельной ФРО (а) и средние повторяемости (б) для реализаций, сгенерированных СВСП, в зависимости от их числа

На рисунке 2.4.а приведена ППФ для гипотетических плоскостей $\{001\}$, определяемая модельной ФРО при $\kappa = 30$. Рисунок 2.4.б изображает стереографические проекции соответствующих единичных векторов, направление которых задается ориентациями, представленными на рисунке 2.2.а. Интенсивности точек в обоих случаях характеризуют значения аналитически вычисленной ППП. При $\varepsilon = 3^\circ$ по указанным величинам в подходе Монте-Карло была оценена согласованная с ними ФРО; результат изображен на рисунке 2.5.а. Каждая точка отображена с полученной для нее оценкой значения. Неполнота информации, соответствующая заданию всего одной ППФ, обуславливает разыгрывание качественно иного распределения по сравнению с заданным. Вместо действительного концентрического сосредоточения реализуется близкое к однородному вдоль ε -трубок, проецируемых на эту ППФ – с наибольшей

плотностью на $\mathcal{O}(\mathbf{k}_3, \mathbf{l}_3, \varepsilon)$. Подобный результат является ожидаемым, поскольку рассматриваемый подход оценивает ФРО, оптимизируя среднеквадратичное отклонение значений воспроизводимой ППП от заданной. Полученные в примере абсолютные разности таких значений, отмеченные на рис. 2.5.б, показывают их удовлетворительную согласованность.

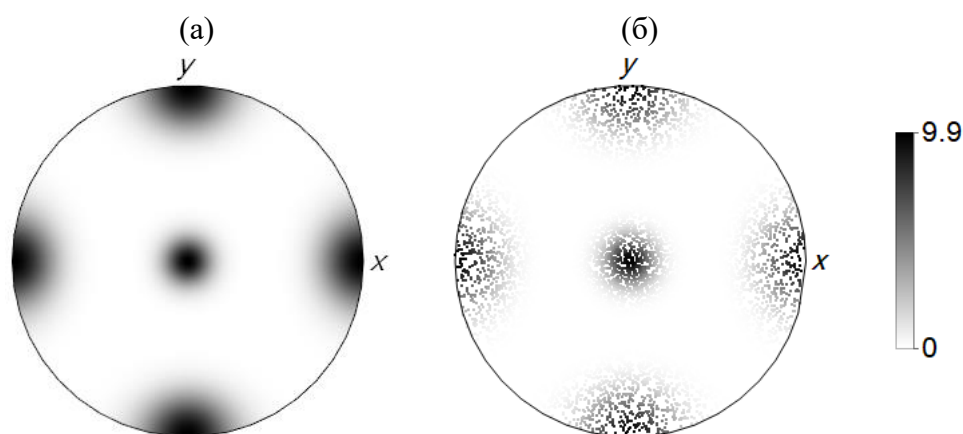


Рисунок 2.4. ППФ, построенная по заданной ФРО (а), и ее покрытие стереографическими проекциями соответствующих единичных векторов, направляемых вспомогательными ориентациями (б)

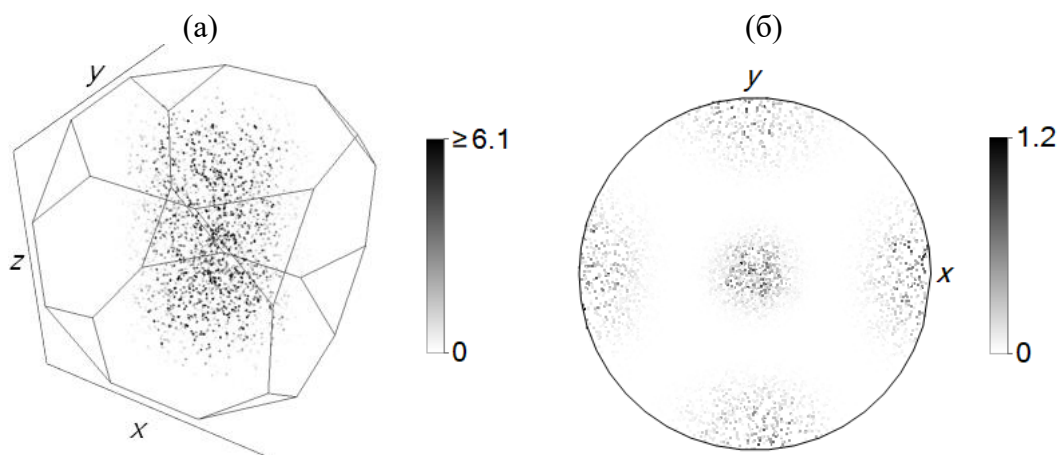


Рисунок 2.5. Оценки значений ФРО на вспомогательной выборке в подходе Монте-Карло для одной ППФ (а) и отклонения воспроизводимых ими величин ППП от заданных (б)

Также в качестве практического приложения рассмотрена оценка ФРО по изображениям реальных ОПФ, заимствованным из статьи Mingyan и др. [114]. Процедура обработки подобных данных строится по аналогии с описанной в настоящем разделе для случая ППФ. В стандартных стереографических треугольниках (ССТ) на рисунке 2.6 отмечены проекции различных направлений

в образце поликристалла, определяемых сгенерированной вспомогательной выборкой из $M = 10^4$ ориентаций. Интенсивности точек показывают значения ОПП, перенормированные при оцифровке отвечающих им ОПФ. Здесь и далее в подразделе заголовки X, Y и Z обозначают проецируемые направления вдоль I_1 , I_2 и I_3 соответственно.

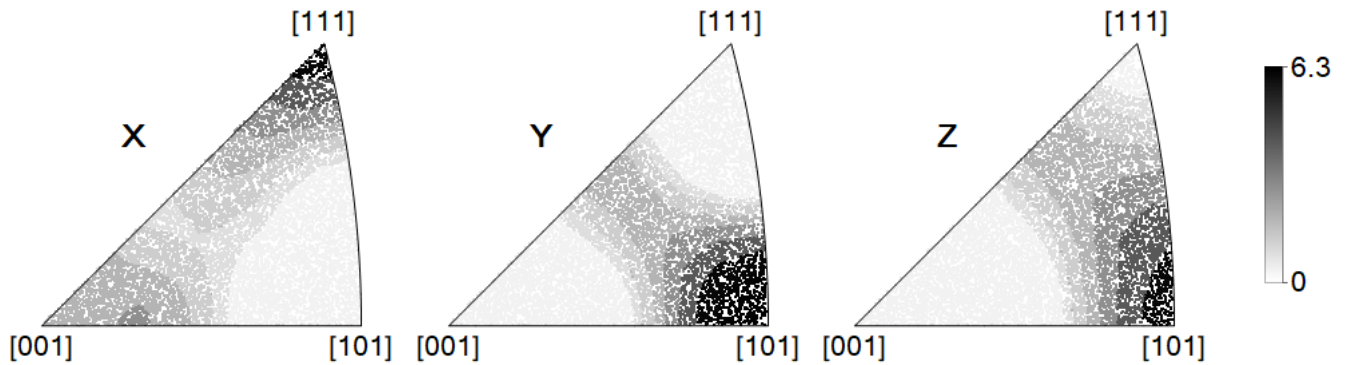


Рисунок 2.6. Покрытие ССТ заданных ОПФ проекциями единичных векторов, направляемых вспомогательными ориентациями

На рисунке 2.7 визуализированы результаты оценки ФРО в подходе Монте-Карло при $\varepsilon = 3^\circ$ для различных наборов учитываемых ОПФ. Можно заметить, что включение в рассмотрение второй ОПФ существенно корректирует образ получаемой вспомогательной выборки. Это и последующее уточнения сопровождаются уменьшением рассогласованности в совокупности воспроизводимых и оцифрованных ОПП. Данный результат можно наблюдать на рисунке 2.7, где изображены абсолютные разности их значений в проекциях на ССТ.

(a)

(б)

(в)

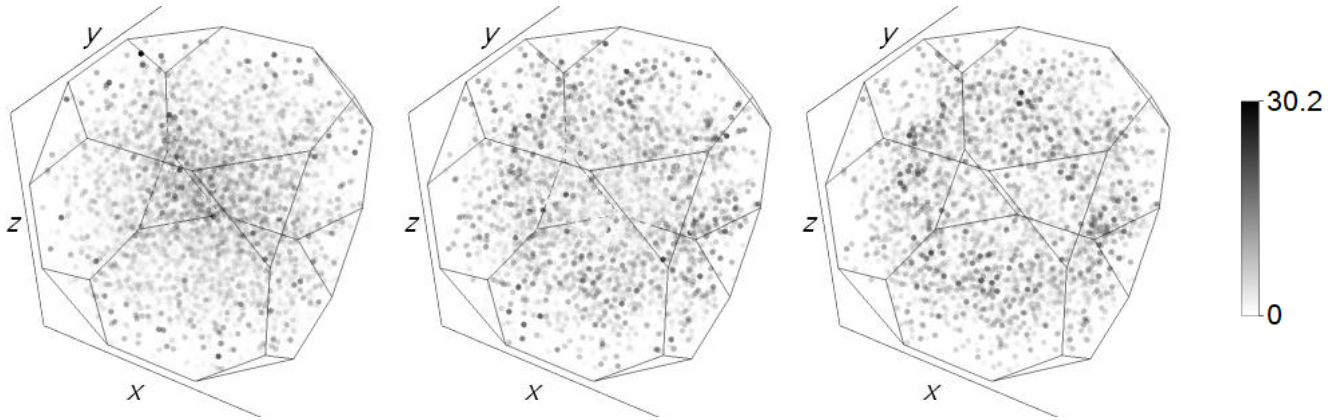


Рисунок 2.7. Оценки значений ФРО на вспомогательной выборке в подходе Монте-Карло для наборов ОПФ: только X (а); только X и Y (б); X, Y и Z (в)

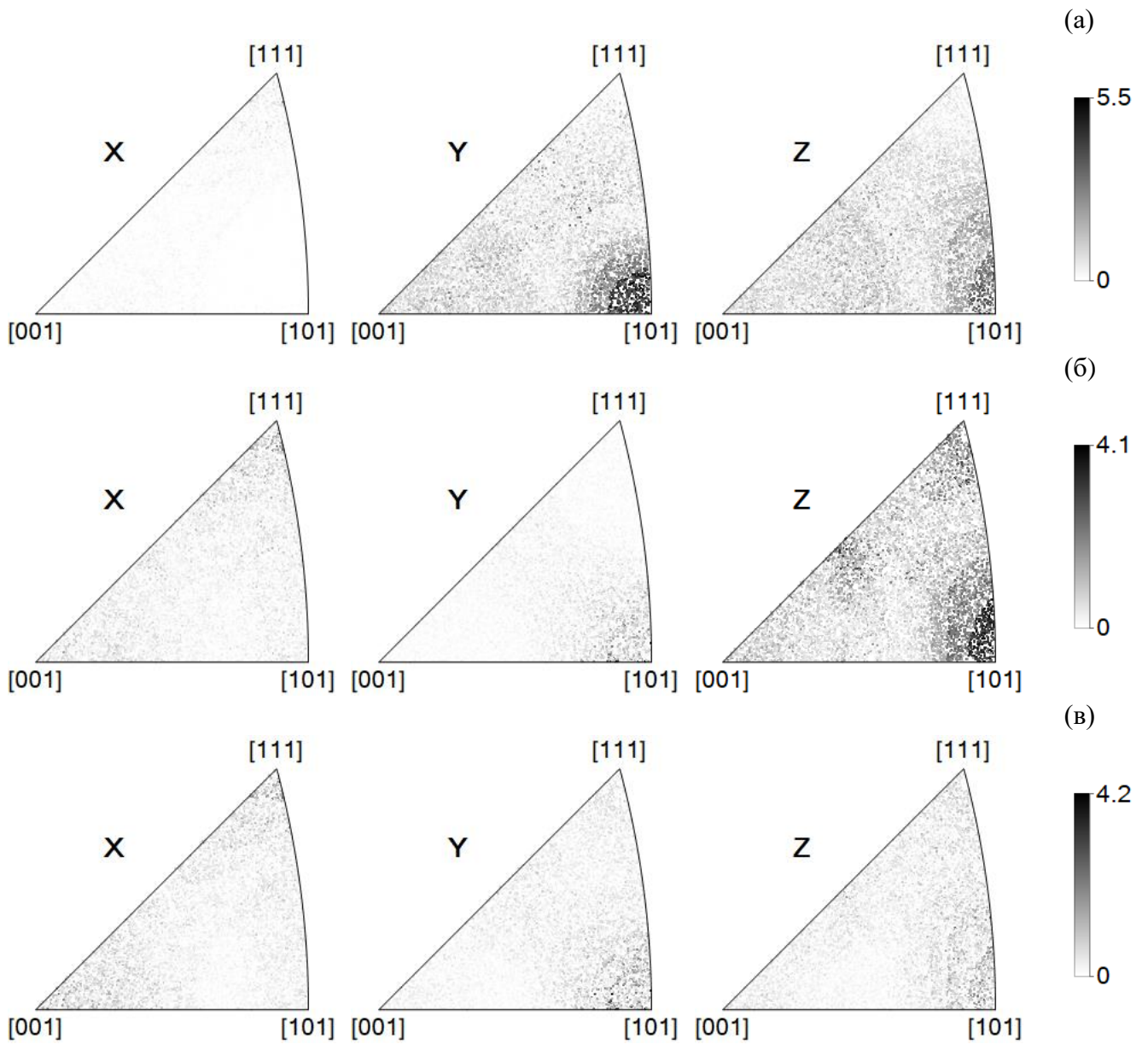


Рисунок 2.8. Отклонения от заданных величин ППП, воспроизводимых оценками значений ФРО на вспомогательной выборке в подходе Монте-Карло для наборов ОПФ: только X (а); только X и Y (б); X, Y и Z (в).

3. Построение пространства текстурных параметров

Equation Chapter 3 Section 1

Каждый расчет процесса деформирования с использованием статистической конститутивной модели предоставляет информацию о текстуре непосредственно в виде выборки ориентаций решеток (возможно, взвешенных с объемами соответствующих кристаллитов). Для каждой итерации T-подзадачи такие выборки необходимо сопоставлять с требуемой в F-подзадаче текстурой, т.е., говоря математическим языком, сравнивать индуцируемые ими ЭМО (ВЭМО) по некоторому метрическому расстоянию с представлением известной МО в каждой материальной точке изделия. Следует заметить, что подходящие для этой цели расстояния не могут быть определены конструктивно, поэтому в численных процедурах рассматриваемые ПМО должны быть предварительно аппроксимированы. С практической точки зрения желательно, чтобы воспроизводящие их пространства параметров в F- и T-подзадаче совпадали. Кроме того, как отмечено ранее, в перспективе оптимизации вызывают интерес параметризации низкой размерности, способные при этом адекватно описывать реализуемые текстуры. По существу, обозначенный вопрос сводится к выбору способа редуцированного представления МО/ФРО. Большая часть потенциально применимых для этой цели приемов уже упомянута во вступлении к главе 2 настоящей диссертации – основанные на них методы получили широкое распространение в текстурном анализе при восстановлении ФРО по полюсным фигурам. Рассмотрим применимость конкретных подходов из определенных ранее групп к решению ЗФОП, отметив некоторые примеры их реализации в аналогичных проблемах.

1. Разложение ФРО в ряды (как правило, Фурье) предполагает отображение информации о текстуре в терминах действительных или комплексных коэффициентов при базисных функциях. Вообще говоря, в роли базиса могут выступать различные системы, но одними из наиболее распространенных, по всей видимости, следует признать обобщенные сферические гармоники [62, 144]. В

подходе Bunge [62] эти функции дополнительно симметризируются, чтобы обеспечить инвариантность представления ФРО относительно преобразований ортогональных групп решетки и образца поликристалла. Альтернативные разложения, удобные для численных приложений, могут быть получены на базе «тензорных» функций Onat и Leckie [143]. Соответствующие им члены ряда имеют вид многочленов относительно компонент кватернионов, параметризующих аргумент ФРО [94]. Разложение Фурье является основой подхода к решению проблем типа ЗФОП, представленного в публикациях Adams, Kalidindi и др. [50, 88, 89] как «microstructure sensitive design». Соответствующие ряды записываются как для ФРО, так и зависящей от ориентации решетки характеристики кристаллита. Гомогенизация, реализующаяся вычислением их скалярного произведения, в таком случае сводится (с учетом ортогональности системы используемых гармоник) к рассмотрению суммы попарных произведений коэффициентов получаемых рядов.

К недостаткам описанного способа редуцирования МРО/ФРО следует отнести необходимость рассмотрения большого количества членов ряда для воспроизведения свойств «заостренных» текстур [154], а также нетривиальный смысл получаемых параметров – коэффициентов разложения.

2. Методы на основе аналитической аппроксимации текстурных компонент сводятся к локальной замене ФРО в окрестностях специальных точек или кривых модельными функциями простого вида [71, 81, 100, 107]. Редуцированное описание текстуры в их случае дается совокупностью параметров, определяющих размеры и формы используемых функций. По заданной выборке ориентаций эти параметры могут быть оценены известными методами математической статистики [58]. В работах Sundararaghavan и Zabaras [150, 151] на основе интенсивностей конкретных компонент проводится предварительная классификация требуемой текстуры. Получаемая в результате информация используется при построении реализующей ее траектории деформирования для извлечения начального приближения из вспомогательной базы данных.

Предоставляемая обозначенным подходом параметризация наиболее удобна для решения F-подзадачи, в которой оптимизируются интенсивности компонент при их фиксированных положениях (определяемых локальными максимумами модельных функций) в ориентационном пространстве. Однако в контексте физической реализуемости текстур возникают вопросы о конкретном наборе требуемых к рассмотрению компонент, их количестве и местах сосредоточения. Для заданных выборок ориентаций подобная информация может быть получена с привлечением методов кластерного анализа. Формулировке соответствующих алгоритмов посвящен раздел 3.2 настоящей диссертации, а также статьи автора [19, 124]. В этих и других публикациях [21, 121, 124-126] по данной теме с использованием реализованного аппарата [37] кластеризации исследуются текстуры, получаемые в расчетах кинематических нагружений поликристаллических агрегатов.

3. К способам описания текстуры в рамках прямой дискретизации ориентационного пространства можно отнести как те, которые непосредственно характеризуют значения МРО на наборе множеств (ячеек) малого диаметра, так и основанные на конечно-элементной аппроксимации ФРО. В первом случае речь идет о рассмотрении «текстурного вектора», задающего некоторую (трехмерную) гистограмму ФРО (возможно, с нетривиальной геометрией ячеек). Второй способ отсылает к упомянутым ранее работам Kumar, Sundararaghavan, Zabaras и др., в которых эволюция текстуры описывается «ориентационно-континуализированной» конститутивной моделью поликристалла, включающей уравнение баланса ФРО. Для численного решения последнего используется МКЭ на фундаментальной области ориентационного пространства. ФРО представляется линейной комбинацией функций формы элементов; вычисление ее коэффициентов осуществляется в подходе Галеркина. Для ускорения вычислительной процедуры применяются известные в гидродинамике приемы – собственное ортогональное разложение, основанное на преобразовании Карунена–Лоэва, или метод кадров, являющийся его упрощенным аналогом [74].

Следует заметить, что описанный способ редуцированного воспроизведения текстуры исходит из рассмотрения именно ФРО, не предполагая возможность непосредственной реализации для ЭМРО (ВЭМРО). Упомянутое первым гистограммное представление в этом плане универсально и, кроме того, удобно для решения одновременно F- и T-подзадачи. Поскольку размерность параметризации в его случае может быть довольно большой, целесообразно рассмотрение дискретизаций ориентационного пространства, адаптированных под характерные для моделируемого процесса деформационной обработки текстурные компоненты. Данный вопрос, уже обозначенный выше, может быть решен с помощью средств кластерного анализа [79, 90].

3.1. Редуцированное представление поля меры распределения ориентаций

Решение F-подзадачи предлагается искать в виде ПМРО Φ на \mathcal{P} (конфигурации изделия), значениями которого в пределах некоторых заранее выбранных материальных подобластей являются фиксированные МРО (с этой точки зрения требуемая ПМРО полагается кусочно-однородной по физическому пространству). Пусть $N_{cs} \in \mathbb{N}$ – количество таких подобластей, условно называемых контрольными, и $\{\mathcal{P}^{(s)} \subset \mathcal{P}\}$ – занимаемые ими конфигурации ($s \in \overline{1, N_{cs}}$): $\bigcup_{s=1}^{N_{cs}} \mathcal{P}^{(s)} = \mathcal{P}$ и $V(\mathcal{P}^{(s)} \cap \mathcal{P}^{(t)}) = 0$ при $s, t \in \overline{1, N_{cs}}$ и $s \neq t$. Текстуры внутри них считаются независимыми и по отдельности описываются параметризованными МРО $\{\Phi^{(s)}(\varphi^{(s)}, \cdot)\}$, в рассматриваемом далее простейшем случае определяемыми как ($s \in \overline{1, N_{cs}}$, $\mathcal{O} \in \mathcal{O}^+$)

$$\Phi^{(s)}(\varphi^{(s)}, \mathcal{O}) = \sum_{m=1}^{N_{om}^{(s)}} \varphi_m^{(s)} \llbracket \mathbf{o}_m^{(s)} \in \mathcal{O} \rrbracket. \quad (3.1)$$

Здесь $\{N_{om}^{(s)} \in \mathbb{Z}^+\}$ обозначают количества (ориентационных) мод в контрольных подобластях, на которых допускаются сосредоточения введенных (дискретных) МРО, $\{\mathbf{o}_m^{(s)}\}$ – задающие их фиксированные ориентации, $\{\varphi_m^{(s)} \in |\mathbb{R}|\}$ – варьируемые

параметры ($m \in \overline{1, N_{\text{om}}^{(s)}}$, $s \in \overline{1, N_{\text{cs}}}$). Как нетрудно видеть, выражение в правой части записанного определения представляет собой взвешенную сумму мер Дирака. Это предельный случай локализации в ориентационном пространстве компонент, на которые «раскладывается» текстура в контрольных подобластях. В таком смысле обозначенные параметры характеризуют относительные интенсивности данных компонент. Таким образом, количество переменных оптимизации в F-подзадаче, определяемое размерностями вектор-строк $\{\varphi^{(s)} = (\varphi_1^{(s)}, \dots, \varphi_{N_{\text{om}}^{(s)}}^{(s)}) \in |\mathbb{R}|^{N_{\text{om}}^{(s)}}\}$ ($s \in \overline{1, N_{\text{cs}}}$), равно $N_{\text{fv}} = \sum_{s=1}^{N_{\text{cs}}} N_{\text{om}}^{(s)} \in \mathbb{Z}^+$. Введя в рассмотрение «расширенную» вектор-строку $\varphi \in |\mathbb{R}|^{N_{\text{fv}}}$ параметров-интенсивностей, собранную по правилу:

$$\varphi = (\varphi^{(1)}, \dots, \varphi^{(N_{\text{cs}})}) = (\varphi_1^{(1)}, \dots, \varphi_{N_{\text{om}}^{(1)}}^{(1)}, \dots, \varphi_1^{(N_{\text{cs}})}, \dots, \varphi_{N_{\text{om}}^{(N_{\text{cs}})}}^{(N_{\text{cs}})}), \quad (3.2)$$

искомое ПМРО можно выразить как ($s \in \overline{1, N_{\text{cs}}}$, $\mathbf{R}_0 \in \mathcal{P}$, $\vartheta \in \mathcal{O}^+$)

$$\Phi(\varphi, \mathbf{R}_0, \vartheta) = \sum_{s=1}^{N_{\text{cs}}} \Phi^{(s)}(\varphi^{(s)}, \vartheta) \llbracket \mathbf{R}_0 \in \mathcal{P}^{(s)} \rrbracket = \sum_{s=1}^{N_{\text{cs}}} \sum_{m=1}^{N_{\text{om}}^{(s)}} \varphi_m^{(s)} \llbracket \mathbf{o}_m^{(s)} \in \vartheta \rrbracket \llbracket \mathbf{R}_0 \in \mathcal{P}^{(s)} \rrbracket. \quad (3.3)$$

Из условий неотрицательности и нормировки МРО следует, что ($s \in \overline{1, N_{\text{cs}}}$)

$$\varphi_m^{(s)} \geq 0, \quad m \in \overline{1, N_{\text{om}}^{(s)}}; \quad (3.4)$$

$$\sum_{m=1}^{N_{\text{om}}^{(s)}} \varphi_m^{(s)} = 1. \quad (3.5)$$

Записанные соотношения ограничивают значения φ множеством $\mathcal{f} \subset |\mathbb{R}|^{N_{\text{fv}}}$, понимаемым как пространство текстурных параметров. Более формально,

$$\mathcal{f} = \mathcal{S}^{(N_{\text{om}}^{(1)})} \times \dots \times \mathcal{S}^{(N_{\text{om}}^{(N_{\text{cs}})})};$$

в свою очередь, $\mathcal{S}^{(N)} \subset |\mathbb{R}|^{N+1}$, где $N \in \mathbb{Z}^+$, обозначает стандартный N -симплекс:

$$\mathcal{S}^{(N)} = \left\{ \mathbf{s} = (s^0, \dots, s^N) \mid \mathbf{s} \in |\mathbb{R}|^{N+1}, \sum_{n=0}^N s^n = 1 \right\}.$$

Совокупность всех ПМРО, определяемых вектор-строками текстурных параметров (ВСТП), конкретизирует \mathcal{F} в формулировке (1.1)-(1.2) F-подзадачи:

$$\mathcal{F} = \{ \Phi(\varphi, \cdot, \cdot) \mid \varphi \in \mathcal{J} \}.$$

Таким образом, ее исходная постановка сводится к задаче поиска ВСТП $\hat{\varphi} \in \mathcal{J}$, для которой

$$f_0(\hat{\varphi}) = \min_{\varphi \in \mathcal{J}} f_0(\varphi); \quad (3.6)$$

$$f_c(\hat{\varphi}) \leq 0, \quad c \in \overline{1, N_{f_c}}. \quad (3.7)$$

Целевой критерий и ограничения здесь выражаются обычными функциями $\{f_c : \mathcal{J} \rightarrow \mathbb{R}\}$, связываемыми с соответствующими $\{F_c\}$ параметризацией (3.1)-(3.3) ($c \in \overline{0, N_{f_c}}$):

$$f_c(\varphi) = F_c(\Phi(\varphi, \cdot, \cdot)).$$

Для решения F-подзадачи в такой формулировке уже применимы стандартные методы численной оптимизации функций нескольких переменных.

Введенные выше ориентационные моды дискретизируют соответствующее пространство для каждой контрольной подобласти изделия в ЗФОП. Их следует воспринимать как положения текстурных компонент, в той или иной мере интенсифицируемых в моделируемом процессе деформационной обработки заготовки. Для получения пространства текстурных параметров как можно меньшей размерности подобную дискретизацию целесообразно адаптировать под текстуры, характерные в варьируемом диапазоне режимов деформирования. В общем случае информация такого рода может отсутствовать и тогда должна быть получена непосредственно перед решением ЗФОП. По существу, речь идет о проведении серии предварительных расчетов режимов с ВСУП из диапазона допустимых значений. Для каждой реализации процесса по получаемым в контрольных подобластях выборкам ориентаций кристаллитов необходимо идентифицировать наборы компонент, редуцированно воспроизводящих сформированную текстуру. Возможный подход к решению этой проблемы, основанный на привлечении методов кластерного анализа, описывается в следующем разделе 3.2.

3.2. Идентификация текстурных компонент

Под кластеризацией выборки ориентаций кристаллических решеток будем понимать ее разбиение на непересекающиеся подмножества, т.е. кластеры, элементы внутри каждого из которых являются в определенном смысле близкими между собой. Условные центры кластеров в рамках такого определения естественно ассоциировать с положениями текстурных компонент в ориентационном пространстве, а суммарные объемные доли приходящихся на них решеток – с интенсивностями. Заметим, что в случае необходимости для кластеров могут вычисляться и различные другие статистики, позволяющие уточнить их морфологические особенности. В первую очередь это представляет интерес при построении пространств текстурных параметров, адаптированных под слабо выраженные текстуры.

Псевдометрическое расстояние

Основу любого алгоритма кластеризации составляет мера схожести группируемых им объектов. В рамках решаемой проблемы роли таких объектов играют ориентации кристаллитов, а в качестве подходящей меры выбирается специальное псевдометрическое (как синоним – полуметрическое) расстояние, инвариантное относительно преобразований группы $S^+ \subset O^+$ поворотной симметрии их решетки (в отличие от метрического, подобное расстояние не предполагает невырожденности на несовпадающих аргументах). Его функцию $\mu_0 : O^{+2} \rightarrow |\mathbb{R}|$ можно ввести следующим образом ($O, P \in O^+$):

$$\mu(O, P) = \min_{S, T \in S^+} \mu_0(O \cdot S, P \cdot T).$$

В качестве μ_0 здесь, вообще говоря, допустимо рассмотрение произвольного метрического расстояния [84] на ориентационном пространстве, но конкретно порожденное естественной римановой метрикой обладает рядом преимуществ. Пользуясь очевидными свойствами, его можно определить как ($O, P \in O^+$)

$$\mu(\mathbf{O}, \mathbf{P}) = \min_{\mathbf{S} \in \mathbb{S}^+} \left\| \ln(\mathbf{O} \cdot \mathbf{P}^T \cdot \mathbf{S}) \right\|. \quad (3.8)$$

Напомним, что \mathbb{S}^+ конечна, т.е. минимизация в записанных формулах носит дискретный характер и предполагает простой перебор. При вычислительной реализации оказывается полезным следующее полученное в работе выражение ($\mathbf{R}(2\alpha, \mathbf{u}), \mathbf{R}(2\beta, \mathbf{v}) \in \mathbb{O}^+$):

$$\begin{aligned} \mu(\mathbf{R}(2\alpha, \mathbf{u}), \mathbf{R}(2\beta, \mathbf{v})) = 2 \min_{\mathbf{R}(2\gamma, \mathbf{w}) \in \mathbb{S}^+} & \arccos \left| \cos \gamma (\cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta \mathbf{u} \cdot \mathbf{v}) - \right. \\ & \left. - \sin \gamma \mathbf{w} \cdot (\sin \alpha \cos \beta \mathbf{u} - \cos \alpha \sin \beta \mathbf{v} + \sin \alpha \sin \beta \mathbf{u} \times \mathbf{v}) \right|. \end{aligned} \quad (3.9)$$

При необходимости его можно легко адаптировать, в частности, под кватернионную [116] и некоторые «neo-Eulerian» [94] параметризации ориентационного пространства.

Для произвольных ориентаций \mathbf{O} и \mathbf{P} выполнено $\mu(\mathbf{O}, \mathbf{P}) = 0$ тогда и только тогда, когда они симметрически эквивалентны, т.е. существует тензор $\mathbf{S} \in \mathbb{S}^+$ такой, что $\mathbf{O} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{S}$. В более общем случае $\mu(\mathbf{O}, \mathbf{P})$ следует понимать как наименьший угол поворота, связывающего \mathbf{O} с каким-либо представителем соответствующего класса эквивалентности \mathbf{P} .

Поскольку ориентационное пространство (в особенности факторизованное симметриями) не является простым (как минимум, линейным) с точки зрения внутренней геометрии, интегрирование по нему в различных численных методах, как правило, является нежелательным. В ряде случаев возникающие в таком контексте вопросы могут быть решены рассмотрением метрических и псевдометрических расстояний, вычисление которых зачастую оказывается менее ресурсозатратным. Применяемые в работе методы кластеризации оперируют как раз с подобными расстояниями, причем исключительно между ориентациями, входящими в заданную выборку. Их предварительное вычисление позволяет абстрагироваться от нетривиальной структуры ориентационного пространства и выделять кластеры с использованием только индексных манипуляций. Реализация

указанного подхода для выборки объема $N \in \mathbb{Z}^+$, содержащей ориентации $\{\mathbf{o}_n\}$, сводится к построению матрицы $M \in [0, \pi]^N$ ($n, p \in \overline{1, N}$):

$$M_{np} = \mu(\mathbf{o}_n, \mathbf{o}_p). \quad (3.10)$$

Эта так называемая матрица разориентаций является симметричной и имеет нулевую главную диагональ. Подобного ей объекта оказывается уже достаточно для применения многих методов кластеризации [79]. В общем случае рассматриваемые ориентации могут относиться к решеткам кристаллитов, обладающих различающимися объемами $\{v_n \in \mathbb{R}^+\}$ ($n \in \overline{1, N}$). Если указанные объемы выражаются рациональными числами, то взвешенную с ними выборку ориентаций при кластеризации естественно считать эквивалентной невзвешенной, в которой каждый элемент повторяется пропорциональное весовому коэффициенту количество раз.

Аппарат кластеризации

В качестве иллюстрирующего примера, сопровождающего последующее описание используемого в работе аппарата кластеризации, рассматривается выборка из $N = 300$ ориентаций вида $\{\mathbf{R}(\alpha_n, \mathbf{u})\}$, где $\mathbf{u} \in \mathcal{U}$ – фиксированный направляющий вектор, а $\{\alpha_n \in [0, \pi]\}$ – углы, отмеченные вертикальными линиями на рисунке 3.1.а ($n \in \overline{1, N}$). С точки зрения весовых коэффициентов все элементы выборки принимаются равнозначными. На ориентационном пространстве вводится искусственная симметрия, характеризуемая группой $\mathbb{S}^+ = \{\mathbf{I}, \mathbf{R}(\pi, \mathbf{u})\}$. Таким образом, рассматриваемые ориентации геометрически интерпретируются как прямые линии, лежащие в ортогональной \mathbf{u} плоскости.

(a)

(б)

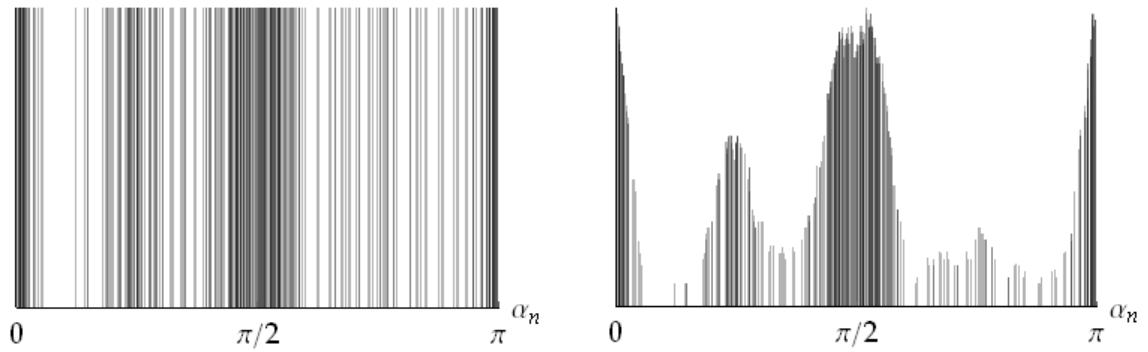


Рисунок 3.1. Ориентации демонстрационной выборки (а) и суммарные весовые коэффициенты их псевдометрических окрестностей (б)

В общем случае текстур количество кластеров априори неизвестно, а возможность их выделения носит условный характер. Для получения адекватного разбиения необходимо связать положения кластеров с областями плотно расположенных друг к другу ориентаций. Оказывается, что подобную задачу можно решить, используя только матрицу разориентаций и весовые коэффициенты. Для этого достаточно ввести в каждой ориентации некоторую псевдометрическую ε -окрестность, где $\varepsilon \in \mathbb{R}^+$, и просуммировать коэффициенты всех находящихся в ней элементов. На результирующий вес тогда можно смотреть как на вычисленное в соответствующей ориентации перенормированное значение ФРО ϕ^m , возникающей при «сглаживании» [158] ВЭМРО рассматриваемой выборки ($\mathbf{O} \in \mathcal{O}$):

$$\phi^m(\mathbf{O}) = \left(\sum_{n=1}^N v_n \right)^{-1} \sum_{n=1}^N v_n \mu(\mathbf{o}_n, \mathbf{O}) < \varepsilon . \quad (3.11)$$

Весовые коэффициенты, полученные таким образом для демонстрационного примера, изображены на рисунке 3.1.а.

Объединение наиболее плотных окрестностей формирует подвыборку, свободную от «шума» из разреженных элементов с малыми весовыми коэффициентами. Для такого множества результат кластеризации, как правило, оказывается предсказуемым, что позволяет привлекать к его получению алгоритмы широкого класса. Рисунок 3.2.а визуализирует на рассматриваемом примере объединение окрестностей, суммарные весовые коэффициенты которых

превышают некоторое критическое значение. Формируемая при этом подвыборка состоит из двух типов ориентаций, относимых соответственно к ядру или периферии – в зависимости от достижения их окрестностями требуемой плотности. Кластеризация такой подвыборки осуществляется независимо от остальной части, то есть описанный выше процесс, по существу, реализует разбиение исходной выборки на слои.

Ориентации каждого слоя целесообразно рассмотреть как вершины графа, предполагая наличие ребер только между близкими (с точки зрения псевдометрического расстояния) элементами. В этом случае максимальные компоненты связности такого графа являются наиболее очевидными кандидатами на роль кластеров. Следует заметить, что в рамках подобного подхода не требуется задавать количество кластеров, а выделение необходимых компонент может быть реализовано непосредственно по матрице разориентаций. Отвечающее описанному способу разбиение понимается в работе как кластеризация по достижимости (или транзитивному замыканию близости), поскольку разделяемые им множества характеризуются отсутствием близких (в установленном смысле) элементов. Соответствующие кластеры демонстрационной выборки представлены на рисунке 3.2.б. Отметим, что в рамках описанной стадии можно рассматривать только ориентации ядра, а периферийные элементы относить к ближайшим установленным кластерам. Подобная схема является разновидностью алгоритма, известного как «DBSCAN» (англ. «density-based spatial clustering of applications with noise») [90, 92].

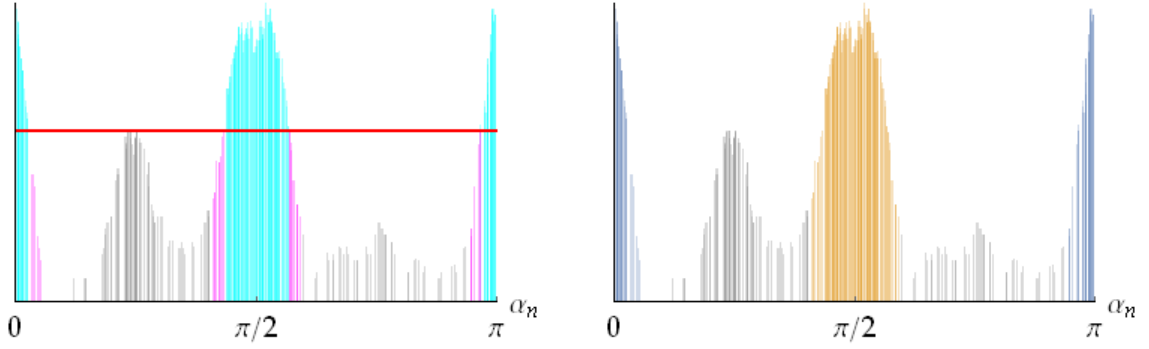


Рисунок 3.2. Ориентации ядра и периферии верхнего слоя выборки (а) и результат их совместной кластеризации по достижимости (б)

Представленные выше методы не предполагают удовлетворение ограничений на формы и размеры получаемых кластеров, а также не способны эффективно контролировать их количество. Вместе с тем для цели редуцированного описания текстуры предпочтительными являются кластеры с концентрической локализацией. В этой связи возникает необходимость в процедуре, позволяющей находить их условные центры и уточнять разбиение. Данный вопрос решается в работе с использованием медоидной кластеризации.

Под медоидом множества понимается такой его элемент, средневзвешенное расстояние от которого до других элементов этого же множества минимально. Пусть $\mathcal{S} \subset \overline{1, N}$ – индексирующее множество рассматриваемой подвыборки ориентаций, $K \in \mathbb{Z}^+$ – фиксированное количество искомым в ней кластеров, c – совокупность дискретных отображений вида $c : \mathcal{S} \rightarrow \overline{1, K}$, ставящих в соответствие индексу $n \in \mathcal{S}$ ориентации порядковый номер $c(n) \in \overline{1, K}$ кластера, которому она принадлежит. Тогда K -медоидная кластеризация [79] (англ. «k-medoids») представляет собой реализацию некоторой стратегии поиска вектор-строки $\mathbf{m} = (m_1, \dots, m_K) \in \mathcal{S}^K$, задающей индексы ориентаций-медоидов, и отображения $c \in \mathcal{c}$ устанавливающего принадлежности ориентаций к кластерам, таких, что

$$D(\hat{\mathbf{m}}, \hat{c}) = \min_{(\mathbf{m}, c) \in \mathcal{S}^K \times \mathcal{c}} D(\mathbf{m}, c); \quad (3.12)$$

$$D(\mathbf{m}, c) = \sum_{k=1}^K \sum_{n \in c^{-1}(k)} v_n M_{m_k n}; \quad (3.13)$$

$$c(m_k) = k, k \in \overline{1, K}. \quad (3.14)$$

По существу, здесь идет речь об итеративной минимизации средневзвешенных отклонений ориентаций от медоидов суммарно по всем искомым кластерам. Один из возможных подходов к этому состоит в установлении медоидов текущих кластеров и последующем переносе ориентаций подвыборки к кластерам с ближайшими медоидами [79]. Вообще говоря, такой способ приводит только к субоптимальному (неулучшаемому при дальнейших итерациях) решению, причем скорость сходимости и качество реализуемого разбиения существенно зависят от начального приближения. В целом, использование в целях его получения предварительной кластеризации по достижимости на практике оказывается весьма эффективным. Следует отметить, что в литературе встречаются и другие подходы к решению задачи (3.12)-(3.14) [90], в том числе на основе глобальной минимизации [106]. Для получения разбиения, в котором каждый кластер характеризуется необходимой степенью локализации распределения (устанавливаемой, например, по средневзвешенному псевдометрическому отклонению ориентаций от медоида), описанный алгоритм можно дополнительно итерировать, заменяя на каждом шаге медоид наименее локализованного кластера на пару его наиболее взвешенно-удаленных ориентаций. Пример результата медоидной кластеризации с подобным расщеплением изображен на рисунке 3.3.

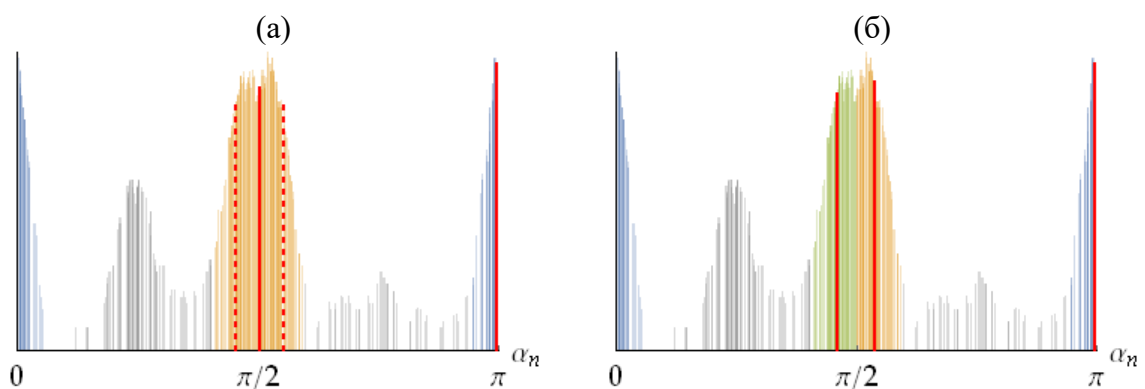


Рисунок 3.3. Результаты медоидной кластеризации слоя без расщепления (а) и с расщеплением (б)

3.3. Оценка значимости текстурных параметров

Конкретизации постановки Т-подзадачи предполагает в том числе указание правила, по которому в ВСТП будут преобразовываться выборки ориентаций, получаемые в расчетах режимов деформирования. Наиболее простым подходом здесь представляется вычисление для каждой контрольной подобласти суммарной объемной доли кристаллитов, расположенных в ориентационном пространстве внутри многогранников Вороного, центрированных на заданных модах. Следует заметить, что в рассматриваемом случае явное описание геометрии таких многогранников не требуется – речь идет об абстрактной дискретизации, возникающей из определения моды, по отношению к которой ориентация преобразуемой выборки является наиболее близкой. В соответствии со сказанным выше, ВСТП $\psi(\tau) \in \mathcal{f}$, получаемая при моделировании режима, задаваемого ВСУП $\tau \in \mathcal{T}$, вычисляется по формуле ($m \in \overline{1, N_{om}^{(s)}}$, $s \in \overline{1, N_{cs}}$):

$$\psi_m^{(s)}(\tau) = \left(\sum_{n \in \mathcal{O}^{(s)}} v_n \right)^{-1} \sum_{n \in \mathcal{O}^{(s)}} v_n \left\| \mathbf{o}_n(\tau) = \min_{p \in \mathcal{O}^{(s)}} \mu(\mathbf{o}_m^{(s)}, \mathbf{o}_p(\tau)) \right\|, \quad (3.15)$$

где $\{\mathbf{o}_n(\tau)\}$ – реализуемые в объеме изделия ориентации кристаллитов, $\{\mathcal{O}^{(s)} \subset \overline{1, N_c}\}$ – индексирующие их множества для установления принадлежности контрольным подобластям ($n \in \overline{1, N_c}$); компоненты $\{\psi_m^{(s)}(\tau)\}$ полагаются сгруппированными в $\psi(\tau)$ по аналогии с правилом (3.2).

Теперь, после уточнения формулировки (1.3)-(1.4), Т-подзадача состоит в нахождении ВСУП $\hat{\tau} \in \mathcal{T}$ такой, что

$$t_0(\hat{\phi}, \psi(\hat{\tau})) = \min_{\tau \in \mathcal{T}} t_0(\hat{\phi}, \psi(\tau)); \quad (3.16)$$

$$T_c(\hat{\tau}) \leq 0, \quad c \in \overline{1, N_{tc}}. \quad (3.17)$$

Здесь $t_0: \mathcal{f}^2 \rightarrow |\mathbb{R}|$ – критерий близости ВСТП, получаемый из T_0 параметризацией (3.1)-(3.3) ($\phi, \psi \in \mathcal{f}$):

$$t_0(\phi, \psi) = T(\Phi(\phi, \cdot, \cdot), \Phi(\psi, \cdot, \cdot));$$

соответственно, наилучшее достижимое ПМРО $\Psi(\hat{\tau})$ в исходной постановке выражается как $(\mathbf{R}_0 \in \mathcal{P}, \vartheta \in \mathcal{O}^+)$

$$\Psi(\tau, \mathbf{R}_0, \vartheta) = \Phi(\psi(\tau), \mathbf{R}_0, \vartheta).$$

Для завершения формулировки (3.16)-(3.17) осталось конкретизировать t_0 . По существу, необходимо выбрать способ, по которому в каждом расчете режима деформирования, проводимого в рамках решения T-подзадачи, будет оцениваться несоответствие реализуемой ВСТП той, которая требуется в F-подзадаче. Целесообразно при этом учесть, что различные текстурные параметры могут оказывать неодинаковое влияние на определяемое ими качество функционирования. Предлагаемый подход к построению подходящего критерия базируется на следующих исключительно формальных рассуждениях, в которых f_0 из F-подзадачи (3.6)-(3.7) считается достаточно гладкой функцией, распространенной на $\mathbb{R}^{N_{fv}}$. Пусть задана вектор-строка $\hat{\varphi} \in \mathbb{R}^{N_{fv}}$, и $\hat{\mathcal{R}} \subset \mathbb{R}^{N_{fv}}$ – ее некоторая открытая окрестность. Рассмотрим разложение f_0 на $\hat{\mathcal{R}}$ в ряд Тейлора, ограничившись членами до второго порядка малости включительно. В таком случае для произвольной вектор-строки $\varphi \in \hat{\mathcal{R}}$ можно записать:

$$f_0(\varphi) \approx f_0(\hat{\varphi}) + \hat{g}(\varphi - \hat{\varphi})^\top + \frac{1}{2}(\varphi - \hat{\varphi})\hat{H}(\varphi - \hat{\varphi})^\top,$$

где $\hat{g} \in \mathbb{R}^{N_{fv}}$ и $\hat{H} \in \mathbb{R}_{N_{fv}}^{N_{fv}}$ – вычисленные для f_0 в $\hat{\varphi}$ соответственно вектор-строка градиента и (симметричная) матрица Гессе. Если теперь предположить, что $\hat{\varphi}$ является решением F-подзадачи (3.6)-(3.7), то из $\hat{g} = \theta$ (т.е. равенства нулю всех частных производных по текстурным параметрам) как необходимого условия минимума следует

$$2(f_0(\varphi) - f_0(\hat{\varphi})) \approx (\varphi - \hat{\varphi})\hat{H}(\varphi - \hat{\varphi})^\top,$$

а \hat{H} дополнительно ограничивается требованием положительной полуопределенности. Правая часть полученного приближенного равенства, таким образом, характеризует чувствительность критерия F-подзадачи к возмущениям

ВСТП в окрестности решения, что наводит на мысль принять ее качестве соотношения для значения $t_0(\hat{\phi}, \varphi)$.

За пределами \mathcal{J} величины f_0 , вообще говоря, не имеют смысла. Поэтому на практике нахождение \hat{H}_0 (численным) дифференцированием представляется не вполне корректным. В этой связи для построения t_0 в виде квадратичной формы предлагается перейти к следующей задаче выпуклой аппроксимации. Конкретно в рамках метода наименьших квадратов требуется определить такую матрицу $\hat{H} \in \mathbb{R}_{N_{fv}}^{N_{fv}}$, что

$$F(\hat{H}) = \min_{H \in \mathbb{R}_{N_{fv}}^{N_{fv}}} F(H); \quad (3.18)$$

$$F(H) = \sum_{p=1}^P \left((\varphi_p - \hat{\phi}) H (\varphi_p - \hat{\phi})^T - 2f_0(\varphi_p) + 2f_0(\hat{\phi}) \right)^2; \quad (3.19)$$

$$\hat{H} = \exp \hat{A} \text{diag } \hat{h} \exp \hat{A}^T, \quad \hat{A} \in \mathbb{R}_{N_{fv}}^{N_{fv}}, \quad \hat{h} \in |\mathbb{R}|^{N_{fv}}; \quad (3.20)$$

$$\hat{A}^T = -\hat{A}. \quad (3.21)$$

Здесь $\{\varphi_p \in \mathcal{J}\}$ – некоторые ВСТП, близкие к решению $\hat{\phi} \in \mathcal{J}$ F-подзадачи (3.6)-(3.7). Следует заметить, что выборка подобных значений отчасти формируется в процессе численной оптимизации многими итерационными схемами. Приведенная здесь постановка учитывает симметричность \hat{H} , оправдывающую действительное спектральное разложение (3.20) с ортогональной матрицей перехода в собственный базис. Условие положительной полуопределенности при этом сводится к требованию неотрицательности собственных чисел, которые, в свою очередь, являются компонентами вектор-строки \hat{h} . Антисимметричность (3.21) введенной матрицы \hat{A} позволяет выразить через нее ортогональную, используя соответствующее экспоненциальное представление.

Полагая ВСТП $\hat{\phi} \in \mathcal{J}$ решением F-подзадачи (3.6)-(3.7), а матрицу $\hat{H} \in \mathbb{R}_{N_{fv}}^{N_{fv}}$ – зависящим от нее решением задачи (3.18)-(3.21), непосредственно

минимизируемый критерий T-подзадачи (3.16)-(3.17), т.е. $t_0(\hat{\phi}, \psi(\cdot))$, можно определить как ($\tau \in \mathcal{T}$)

$$t_0(\hat{\phi}, \psi(\tau)) = (\psi(\tau) - \hat{\phi}) \hat{H} (\psi(\tau) - \hat{\phi})^T. \quad (3.22)$$

Его использование дает возможность в некотором приближении учесть значимости различных текстурных параметров, т.е. количественно оценить целесообразность достижения ими в результате процесса деформационной обработки заготовки величин, предполагаемых наилучшим функционированием изделия.

4. Решение задачи функционально-ориентированного проектирования

Equation Chapter 4 Section 1

Представленные в диссертации подходы объединяются в способ решения ЗФОП, описанию которого посвящена настоящая глава. Предлагаемый порядок его реализации раскрывается схемой, изображенной на рисунке 4.1. Для каждого обозначенного этапа необходимо выполнение всех предшествующих, указанных основаниями идущих к нему стрелок. Таким образом, проектирование рационально текстурированного изделия происходит в направлении от моделирования опорных режимов к решению последовательно конкретизируемой Т-подзадачи.

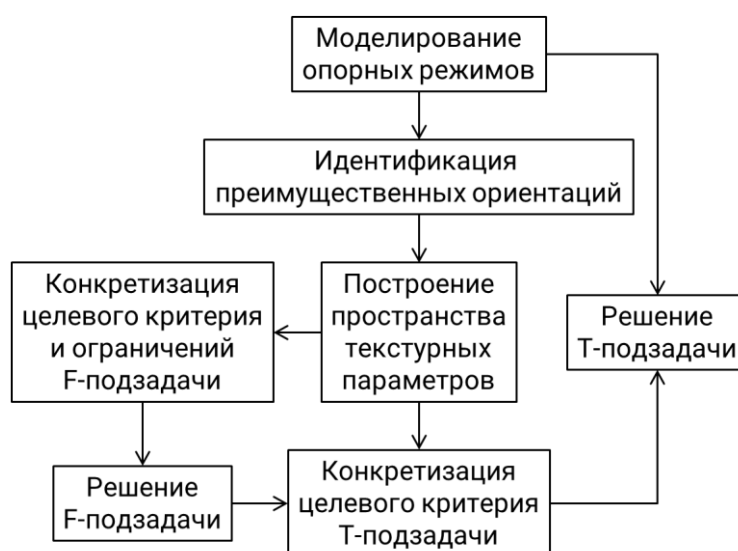


Рисунок 4.1. Реализация последовательности решения ЗФОП

4.1. Основная процедура

Моделирование опорных режимов предполагает проведение серии предварительных прямых расчетов реализаций процесса деформационной обработки, конкретизируемых различными ВСУП из допустимого диапазона их варьирования. Такой этап преследует две цели: во-первых, получение начальных приближений минимизирующих последовательностей для численного решения Т-подзадачи, а во-вторых, установление ориентационных мод для построения

пространства текстурных параметров, адаптированного под потенциально возможные текстуры.

Идентификация преимущественных ориентаций производится для выборок, реализуемых в расчетах опорных режимов. С привлечением аппарата кластерного анализа в контрольных подобластях каждого получаемого изделия определяются наиболее интенсивные текстурные компоненты. Эта информация используется для выделения ориентационных мод, в которых сосредотачиваются МРО при редуцированной параметризации.

Пространство текстурных параметров строится путем объединения наборов установленных в каждой контрольной подобласти мод по всем реализациям опорных режимов. В результате в указанных областях индуцируются дискретизации ориентационного пространства, адаптированные под локально наблюдаемые в них текстуры. Множество возможных ПМРО для последующего решения F- и T-подзадачи при этом редуцируется до класса, воспроизводимого ВСТП соответствующего типа.

F-подзадача считается полностью поставленной только в том случае, когда ее целевой критерий и ограничения выражаются в терминах ВСТП. На практике этот этап предполагает программную реализацию алгоритма, подготавливающего модель текстурированного изделия в зависимости от входных данных. В результате минимизации критерия получается ВСТП, на приближение к которой далее ориентируется T-подзадача.

Конкретизация формулировки T-подзадачи сводится к построению критерия близости двух ВСТП, одна из которых является решением F-подзадачи. Предварительно анализируется чувствительность критерия F-подзадачи к возмущениями такой ВСТП, что позволяет оценить значимости ее различных компонент с позиции их вклада в оптимальность функционирования изделия. Использование данной информации реализуется в виде построения квадратичной формы, играющей роль «расстояния» до требуемой текстуры. В ходе численного решения T-подзадачи ее значение минимизируется с подстановкой на каждой итерации ВСТП, получаемой в результате режима деформирования с некоторой

ВСУП. Начальные приближения для соответствующей итерационной процедуры задаются ранее смоделированными опорными режимами.

4.2. Демонстрационный пример

Далее описываются конкретные результаты, полученные при решении одного упрощенного в демонстрационных целях примера ЗФОП. В роли заготовки/изделия рассматривался представительный объем поликристаллической меди (обладающей гранцентрированной кубической решеткой), задаваемый агрегатом из $N_c = 10^3$ кристаллитов. С точки зрения процедуры решения такому случаю условно соответствует единственная контрольная подобласть: $N_{cs} = 1$.

В качестве процесса деформационной обработки заготовки исследовалось модельное приближение двух проходов равноканального прессования под прямым углом, описываемых активными стадиями кинематического нагружения с постоянными градиентами $\lambda^{(1)}, \lambda^{(2)}(\tau) \in \mathbb{E}_3^{(2)}$ скорости перемещения. Режим деформирования во втором проходе (задаваемый $\lambda^{(2)}(\tau)$) варьировался параметром $\tau_1 \in [0, 180^\circ]$, эффективно воспроизводящим предварительный поворот заготовки на соответствующий угол вокруг оси подачи:

$$\begin{aligned} \lambda^{(1)} &= 5 \times 10^{-4} (-\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 \mathbf{l}_2 + \mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2 - \mathbf{l}_2 \mathbf{l}_1) \mathbf{c}^{-1}; \\ \lambda^{(2)}(\tau_1) &= 2.5 \times 10^{-4} \left(-\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_1 + \cos^2 \tau_1 \mathbf{l}_2 \mathbf{l}_2 + \sin^2 \tau_1 \mathbf{l}_3 \mathbf{l}_3 + \right. \\ &\quad \left. + \cos \tau_1 (\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_2 - \mathbf{l}_2 \mathbf{l}_1) + \sin \tau_1 (\mathbf{l}_1 \mathbf{l}_3 - \mathbf{l}_3 \mathbf{l}_1) + \cos \tau_1 \sin \tau_1 (\mathbf{l}_2 \mathbf{l}_3 + \mathbf{l}_3 \mathbf{l}_2) \right) \mathbf{c}^{-1}. \end{aligned}$$

Каждая стадия длилась 2×10^3 с и завершалась упругой разгрузкой до нулевых макроскопических напряжений. Таким образом, в Т-подзадаче формально рассматривалась (однокомпонентная) ВСУП – $\tau = (\tau_1) \in \mathcal{T}$, где $\mathcal{T} = [0, 180^\circ]$.

Технологические ограничения в выбранном примере отсутствовали: $N_{tc} = 0$.

Требуемое функционирование получаемого изделия определялось наименьшей величиной эффективной податливости на растяжение/сжатие в направлении \mathbf{l}_1 :

$$F_0(\Phi) = \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1 : \langle \boldsymbol{\pi}, \Phi \rangle^{\ominus 1} : \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1 = \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1 : \left(\int_{\mathbf{o} \in \mathbb{O}^+} \mathbf{o} * \boldsymbol{\pi}^\# d\Phi(\mathbf{o}) \right)^{\ominus 1} : \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1.$$

Дополнительные ограничения, помимо необходимых с точки зрения определения ПМРО/МРО, не вводились: $N_{fc} = 0$.

Все вычисления для сформулированного выше примера проводились в рамках конститутивной модели, изложенной в разделе 2.2 настоящей диссертации. Использованные значения материальных констант, приведенные в монографии Трусова и Швейкина [39], обеспечивают удовлетворительное соответствие результатов расчетов экспериментальным ППФ, представленным в статье Anand [52].

В качестве опорных были выбраны режимы, задаваемые $\tau \in \{0, 90^\circ, 180^\circ\}$. На рисунке 4.2.а изображены реализованные в них выборки ориентации и наиболее плотные идентифицированные кластеры. В результате объединения наборов установленных в каждом случае меоидов (со слиянием близких элементов) было получено пространство текстурных параметров, $\mathcal{f} = \mathcal{S}^{(N_{om}^{(1)})}$, состоящее из $N_{fv} = N_{om}^{(1)} = 7$ отмеченных на рисунке 4.2.б ориентационных мод, т.е. $\{\mathbf{o}_m^{(1)}\}$ ($m \in \overline{1, N_{om}^{(1)}}$).

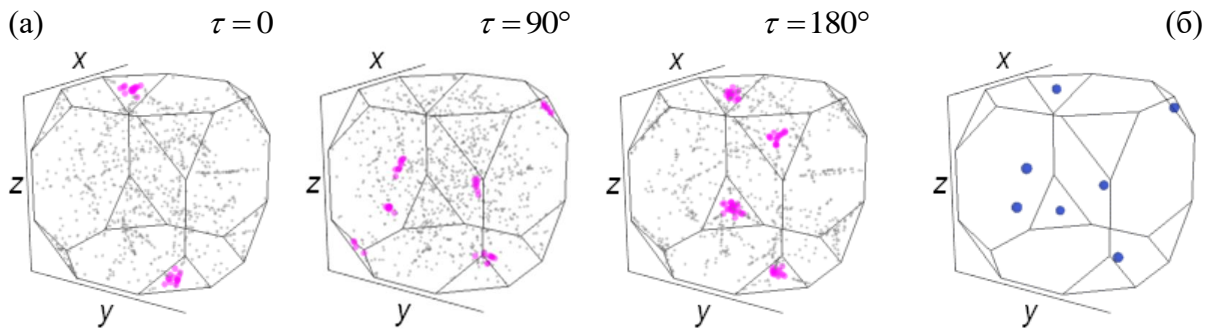


Рисунок 4.2. Текстуры с выделенными наиболее плотными кластерами идентифицированных преимущественных ориентаций, полученные при моделировании опорных режимов (а), и ориентационные моды построенного на их основе пространства текстурных параметров (б)

F-подзадача (3.6)-(3.7) для построенного по формулам (3.1)-(3.3) типа ВСТП, т.е. $\varphi = (\varphi_1^{(1)}, \dots, \varphi_{N_{\text{om}}^{(1)}}^{(1)}) \in \mathcal{f}$, состоит в минимизации критерия:

$$f_0(\varphi) = \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1 : \left(\sum_{m=1}^{N_{\text{om}}^{(1)}} \varphi_m^{(1)} \mathbf{o}_m^{(1)} * \boldsymbol{\pi} \right)^{\ominus 1} : \mathbf{1}_1 \mathbf{1}_1.$$

В рамках дополнительного исследования к числу его переменных добавлялся еще один параметр – $\varphi_0^{(1)} \in [0, 1]$, задающий долю равномерной МРО в рассматриваемом объеме поликристалла. Следует заметить, что полученное в результате решение характеризуется отсутствием такой доли: $\hat{\varphi}_0^{(1)} = 0$. Данное обстоятельство указывает на наличие в пространстве текстурных параметров компонент, интенсификация которых благоприятна для улучшения качества функционирования. Найденная при минимизации ВСТП $\hat{\varphi}$ приведена в таблице 4.1, в которой $\{(x_m^{(1)}, y_m^{(1)}, z_m^{(1)}) \in \mathbb{R}^3\}$ обозначают координаты Родрига рассматриваемых ориентационных мод ($m \in \overline{1, N_{\text{om}}^{(1)}}$): $(x_m^{(1)}, y_m^{(1)}, z_m^{(1)}) = \mathbf{R}(\boldsymbol{\rho}(\mathbf{o}_m^{(1)}))$. Существенно отличными от нуля в полученном решении являются только три компоненты; отвечающая им идеальная текстура изображена на рисунке 4.3.

Таблица 4.1. Решение F-подзадачи с рассмотрением доли равномерной МРО

m	$x_m^{(1)}$	$y_m^{(1)}$	$z_m^{(1)}$	$\varphi_m^{(1)}$
0	–	–	–	0.
1	0.35	–0.06	0.13	0.
2	0.35	–0.12	–0.07	0.
3	–0.34	–0.32	–0.34	0.
4	0.04	0.25	–0.35	0.52
5	–0.34	0.34	0.32	0.31
6	–0.35	–0.06	–0.15	0.
7	–0.33	–0.33	0.33	0.16

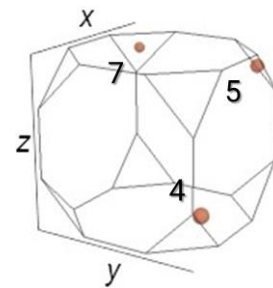


Рисунок 4.3. Ориентационные моды нетривиальных компонент решения F-подзадачи

С целью оценки значимостей различных текстурных параметров в окрестности решения F-подзадачи было сгенерировано 18 случайных ВСТП. Для этого разыгрывались аддитивные смещения, подчиненные равномерному закону в области, определяемой из необходимых для реализуемых вектор-строк

ограничений вида (3.4)-(3.5). Из решения задачи (3.18)-(3.21) была вычислена (симметричная) положительно полуопределенная матрица, квадратичная форма которой локально аппроксимирует критерий F-подзадачи. Параметризующие ее в рамках использованного разложения (3.20) собственные числа и направления приведены в таблице 4.2

Таблица 4.2. Спектральные характеристики матрицы значимостей текстурных параметров

Собственное число $\times 10^2$	Компоненты нормированного собственного направления						
17.26	0.11	0.07	-0.36	-0.2	0.03	0.02	-0.21
15.73	-0.2	0.06	-0.17	0.15	-0.28	0.12	0.02
10.61	0.1	-0.39	0.01	-0.11	-0.11	0.25	0.03
7.47	-0.34	-0.02	0.13	-0.32	-0.04	-0.03	-0.11
7.21	0.2	0.05	0.09	-0.11	-0.34	-0.21	0.
3.78	0.02	0.17	-0.06	-0.22	0.02	0.11	0.4
0.	-0.1	-0.22	-0.19	0.01	0.03	-0.29	0.16

На рисунке 4.4 в зависимости от параметра режима деформирования (τ) графически показаны значения критериев F- и T-подзадачи, вычисленные по представлениям реализованной в соответствующем расчете текстуре. Каждая точка кривой, отнесенной к F-подзадаче с нередуцированной текстурой, определяет эффективную податливость материала изделия через осреднение упругих свойств его кристаллической решетки по всей полученной выборке ориентаций. В случае редуцированного представления данная выборка предварительно преобразуется в ВСТП по формуле (3.15), после чего аналогичное осреднение происходит с индуцируемой ей (редуцированной) МРО. Наконец, оставшаяся кривая изображает рельеф непосредственно минимизируемого критерия T-подзадачи. Для получения корректного результата при решении ЗФОП необходимо, чтобы точки минимумов обозначенных кривых коррелировали. Наименьшая (т.е. наилучшая) реализуемая величина податливости в данном случае составляет 90.8% от возможного максимума (т.е. наихудшей величины). Решение, найденное предложенным в работе способом, доставляет данному соотношению близкое значение 91.4%. Следует заметить,

что этот результат может быть улучшен за счет построения пространства текстурных параметров большей размерности, ограниченной в рассмотренном примере из демонстрационных соображений.

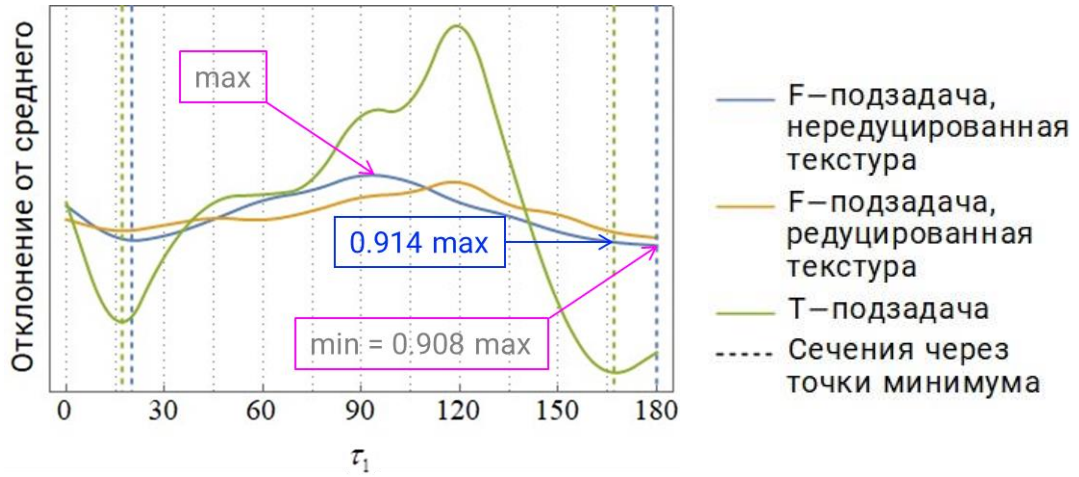


Рисунок 4.4. Вычисленные по реализованным текстурам целевые критерии ЗФОП в зависимости от параметра режима деформирования заготовки

Заключение

Диссертационная работа посвящена развитию методологии вычислительного проектирования рационально текстурированных поликристаллических изделий с использованием многоуровневых физически-ориентированных моделей. Резюмируя весь изложенный выше материал, подведем итоги выполнения перечисленных во введении основных задач, представляющих ключевые этапы достижения обозначенной цели.

1. В общем виде поставлена ЗФОП текстурированного поликристаллического изделия и формализована ее математическая структура. Сформулирована система связанных оптимизационных подзадач, отвечающих стадиям функционирования готового изделия (F-подзадача) и деформационной обработки его заготовки, реализующей текстурирование (Т-подзадача). Решение подобных систем представляет способ определения режимов технологических процессов для изготовления деталей и конструкций с улучшенными эксплуатационными характеристиками.

2. Сформулирована геометрически нелинейная контактная начально-краевая задача для описания деформирования заготовки при помощи инструмента, основанная на варианте статистической двухуровневой конститутивной модели упруговязкопластического поликристалла. Постановка выполнена в скоростной форме для случая квазистатического изотермического приближения описания процесса, в котором деформации инструмента полагаются пренебрежимо малыми. Задачи такого рода возникают при физически-ориентированном моделировании технологических операций ИПД, требующем рассмотрения текстурообразования.

3. Разработаны алгоритмы корректной реализации в численных расчетах для сформулированной задачи контактных краевых и начальных условий. Предлагаемый способ учета контакта основывается на подходе «узел–поверхность» в рамках МКЭ. Соотношения конечного типа по напряжениям сводятся к согласованным с ними смешанным условиям, итерировуемым на каждом

срезе по времени. Для случая наличия предварительной текстуры построены алгоритмы класса Монте-Карло, позволяющие задать в начальных условиях задачи исходную выборку ориентаций, явным образом входящую в конститутивную модель материала рассмотренного типа. В качестве входных данных допускаются изображения экспериментальных прямых и обратных полюсных фигур.

4. Предложен способ редуцированного представления текстур для решения оптимизационных (F- и T-) подзадач, сформулированных в рамках ЗФОП. Соответствующее параметрическое пространство строится адаптивно – исходя из характерных текстурных компонент, реализуемых в варьируемом диапазоне режимов моделируемого процесса деформирования заготовки. Их идентификация осуществляется по результатам расчетов серии опорных режимов с привлечением методов кластерного анализа. При этом каждому текстурному параметру приписывается значимость, определяемая оценкой его вклада в оптимальность функционирования изделия на основе выпуклой квадратичной аппроксимации соответствующего критерия.

5. Построена последовательность решения ЗФОП и рассмотрена реализация каждого из ее этапов. В качестве демонстрационного примера выбрано модельное приближение процесса равноканального прессования под прямым углом с двумя проходами, направленное на получение образца поликристаллической меди с наименьшей упругой податливостью на растяжение/сжатие в заданном направлении. Найденное с использованием разработанной методики решение обеспечивает для указанной характеристики значение, близкое к достижимому оптимуму.

Литература

1. Аннин Б.Д., Остросаблин Н.И. Анизотропия упругих свойств материалов // ПМТФ. – 2008. – Т. 49, № 6. – С. 131–151.
2. Ашкенази Е.К., Ганов Э.В. Анизотропия конструкционных материалов: Справочник (2-е изд.). – Л.: Машиностроение. Ленингр. отделение, 1980. – 247 с.
3. Беляев С.П., Волков А.Е., Ермолаев В.А., Каменцева З.П., Кузьмин С.Л., Лихачев В.А., Мозгунов В.Ф., Разов А.И., Хайров Р.Ю. Материалы с эффектом памяти формы. Справ. изд. В 4 т. / Под ред. В. А. Лихачева. СПб: Изд-во НИИХ СПбГУ, 1998. – Т. 1. 424 с.; Т. 2. 374 с.; Т. 3. 474 с.; Т. 4. 268 с.
4. Берестова С.А., Митюшов Е.А. О физических уравнениях теории пластического течения анизотропных металлов // Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2004. – № 5. – С. 96–105.
5. Бураго Н.Г., Кукуджанов В.Н. Обзор контактных алгоритмов // Изв. РАН. МТТ. – 2005. – № 1. – С. 45–87.
6. Вейль А. Интегрирование в топологических группах и его применения – М.: Издательство иностранной литературы, 1950. – 224 с.
7. Вейль Г. Классические группы. Их инварианты и представления. – М.: Государственное издательство иностранной литературы, 1947. – 404 с.
8. Галин А. Контактные задачи теории упругости, – М.: Гостехиздат, 1953. – 264 с.
9. Горячева И.Г. Механика фрикционного взаимодействия. М: Наука, 2001, 478 с.
10. Горячева И.Г., Добычин М.Н. Контактные задачи в трибологии. – М.: Машиностроение, 1988. – 256 с.
11. Демкин Н.Б. Контактное шероховатых поверхностей. – М: Наука, 1970. – 227 с.
12. Жилин П.А. Модифицированная теория симметрии тензоров и тензорных инвариантов // Известия вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. – 2003. – С. 176-195.

13. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. – М. Наука: 1976. – 544 с.
14. Кострикин А. И. Введение в алгебру. – М.: Наука, 1977, – С. 57
15. Кравчук А.С. Вариационный метод в контактных задачах. Состояние проблемы, направления развития // ПММ. 2009. – Т. 73, № 3. – С. 492–502.
16. Лихачев В. А., Малинин В. Г. Структурно-аналитическая теория прочности. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.
17. Макаров П. В., Романова В. А., Балахонов Р. Р. Моделирование неоднородной пластической деформации с учетом зарождения локализованных пластических сдвигов на границах раздела // Физическая мезомеханика. – 2001. – Т. 4, № 5. – С. 29–39.
18. Маркин А.А., Соколова М.Ю. Нелинейные соотношения анизотропной упругости и частный постулат изотропии // Прикладная математика и механика. – 2007. – Т. 71. № 4. – С. 587-594.
19. Остапович К.В., Трусов П.В. Исследование кристаллографических текстур при многоуровневом моделировании деформирования поликристаллов с помощью методов кластерного анализа // Вычислительная механика сплошных сред / Computational Continuum Mechanics. – 2019. – Т. 12, № 1. – С. 67–79.
20. Остапович К.В., Трусов П.В. Об анизотропии упругих материалов: идентификация симметричных свойств // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2016. – Т. 22, № 1. – С. 69–84
21. Остапович К.В., Трусов П.В., Янц А.Ю. Прогнозирование образования кристаллографических текстур при интенсивном неупругом деформировании поликристаллических образцов на основе двухуровневой статистической упруговязкопластической модели // Физическая мезомеханика. – 2020. – Т. 23, № 5. – С. 20-33.
22. Остробаблин Н.И. Об инвариантах тензора четвертого ранга модулей упругости // Сиб. журн. индустр. математики. –1998. – Т. 1, № 1. – С. 155–163.
23. Панин В.Е. Основы физической мезомеханики // Физическая мезомеханика. – 1998. –Т. 1, № 1. – С. 5–22.

24. Панин В.Е., Егорушкин В. Е., Макаров П.В. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т. Т. 1. – Новосибирск: Наука. Сибирская издат. фирма РАН, 1995. – 298 с.
25. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Панин А.В. Физическая мезомеханика деформируемого твердого тела как многоуровневой системы. I. Физические основы многоуровневого подхода // Физическая мезомеханика. – 2006. –Т. 9, № 3. – С. 9–22.
26. Панин В.Е., Макаров П. В., Псахье С.Г. и др. Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов: В 2-х т. Т. 2. – Новосибирск: Наука. Сибирская издат. фирма РАН, 1995. – 320 с.
27. Победря Б.Е. Механика композиционных материалов. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1984. – 336 с.
28. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М: Наука, 1986. – 232 с.
29. Попов В.Л. Механика контактного взаимодействия и физика трения. От нанотрибологии до динамики землетрясений. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. – 352 с.
30. Рид М., Саймон Б. Методы современной математической физики. Т. 1. Функциональный анализ. – М.: Мир, 1977. – 357 с.
31. Романова В.А., Балохонов Р.Р., Батухтина Е.Е., Емельянова Е.С., Сергеев М.В. О решении квазистатических задач микро- и мезомеханики в динамической постановке // Физическая мезомеханика. – 2018. –Т. 21, № 2. – С. 68-79.
32. Рыхлевский Я. О законе Гука // Прикладная математика и механика. – 1984. – Т. 48, № 3. – С. 420-435.
33. Седов Л. И. Механика сплошной среды. Т. 1. – М.: Наука, 1970а. – 492 с.
34. Столбов В.Ю., Трусов П.В. Связанная задача оптимизации процессов упругопластического деформирования металлов // Прикладная математика и механика. 1999. Т.63. №.4. С.687-695.
35. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. – М.: Мир, 1975. – 592 с.

36. Трусов П.В., Остапович К.В. Пакет подпрограмм для генерации выборок ориентаций кристаллических решеток по набору полюсных фигур (crystex). – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2023668203 от 24.08.2023
37. Трусов П.В., Остапович К.В. Программный модуль для послойной кластеризации кристаллографической текстуры по взвешенной выборке ориентаций кристаллитов (ПККТ). – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021662416 от 28.07.2021
38. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физ. мезомех. – 2011. – Т. 14. – № 4. – С. 17-28.
39. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019.
40. Халмош П. Теория меры – М.: Издательство иностранной литературы, 1953. – 291 с.
41. Христич Д.В. К вопросу об определении главных осей анизотропии материала // Известия ТулГУ. Естественные науки. – 2014. – №2. – С. 203-213.
42. Христич Д.В. Компьютерное моделирование экспериментов по определению типа начальной анизотропии упругих материалов // Известия ТулГУ. Естественные науки. – 2014. – №4. – С. 110-119.
43. Цвелодуб И.Ю. К определению упругих характеристик анизотропных тел // ПМТФ. –1994. – Т. 35, № 3. – С. 145–149.
44. Черных К.Ф. Введение в анизотропную упругость. – М.: Наука, 1988 – 190 с.
45. Шилов Г.Е., Гуревич Б.Л. Интеграл, мера и производная. Общая теория (2-е изд.). – М.: Наука, 1967. – 220 с.
46. Штаерман И.Я. Контактная задача теории упругости. – М: Гостехиздат, 1949. – 270 с.

47. Шутц. Б. Геометрические методы математической физики. – М., Мир, 1984. – 304 с.
48. Acar P., Sundararaghavan V. Utilization of a Linear Solver for Multiscale Design and Optimization of Microstructures // *AIAA Journal*. – 2016. – Vol. 54, No. 5. – P. 1751–1759.
49. Acharjee S., Zabaras N. A proper orthogonal decomposition approach to microstructure model reduction in Rodrigues space with applications to optimal control of microstructure-sensitive properties // *Acta Mater.* – 2003. – Vol. 51, No. 18. – P. 5627–5646.
50. Adams B.L., Henrie A., Henrie B., Lyon M., Kalidindi S.R., Garmestani H. Microstructure-sensitive design of a compliant beam // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2001. – Vol. 49, No. 8. – P. 1639–1663.
51. Anagnostou G., Mavriplis C., Patera A.T. On the mortar element method: generalizations and implementations // In: *Third International Symposium on Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations* (SIAM, Philadelphia, 1990). – P. 157–173.
52. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Computer methods in applied mechanics and engineering*. – 2004. – Vol. 193. – P. 5359–5383.
53. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // *Acta Metall.* – 1985. – Vol. 33, N 6. – P. 923–953
54. Barber. J.R. *Contact Mechanics*. – Springer, Heidelberg, 2018.
55. Belgacem F.B., Hild P., Laborde P. The Mortar Finite Element Method for Contact Problems // *Mathl. Comput. Modelling*. –1992. – Vol. 28, No. 4-8. –P. 263–271.
56. Bernardi C., Maday Y., Patera A.T. A new nonconforming approach to domain decomposition: the mortar element method // In: H. Brezia, J. L. Lions (Eds.), *Nonlinear Partial Differential Equations and Their Applications* (Pitman and Wiley, London, 1992) – P. 13–51.

57. Bertram A. Mathematical Preparation. // In: Elasticity and Plasticity of Large Deformations: An Introduction. – Springer: Berlin/Heidelberg, Germany, 2012. – P. 3–90.
58. Billingsley P. Probability and Measure. – Wiley, New York, 1995.
59. Bishop J.F. W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face-centered metal // Phil. Mag. Ser.7. – 1951. – Vol. 42, No. 334. – P. 1298–1307.
60. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses // Phil. Mag. Ser. 7. – 1951. – Vol. 42, No. 327. – P. 414–427.
61. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals // Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. – 1992. – Vol. 341. – P. 443–477.
62. Bunge H.J. Texture Analysis in Materials Science. – Butterworth-Heinemann, London, 1982.
63. Busso E.P. Multiscale Approaches: From the Nanomechanics to the Micromechanics // In: Computational and Experimental Mechanics of Advanced Materials; Silberschmidt, V.V., Ed.; – Springer, Berlin/Heidelberg, Germany, 2006. – P. 141–165.
64. Chateigner D. Combined Analysis, John Wiley & Sons, London, 2013.
65. Cowin S.C., Mehrabadi M.M. On the identification of material symmetry for anisotropic elastic materials // Q. J. Mech. Appl. Math. – 1987. – Vol. 40, No. 4. – P. 451–476.
66. Dahms M., Bunge H.J. A positivity method for the determination of complete orientation distribution functions // Textures Microstruct. – 1988. – Vol. 10, – P. 21–35.
67. Danek T., Kochetov M., Slawinski M.A. Uncertainty analysis of effective elasticity tensors using quaternion-based global optimization and Monte-Carlo method // Q. J. Mech. Appl. Math. – 2013. – Vol. 66, No. 2. – P. 253–272.
68. Danek T., Slawinski M.A. On Choosing Effective Elasticity Tensors Using a Monte-Carlo Method. // ActaGeophys. – 2015. – Vol. 63. – P. 45–61.

69. Danek T., Slawinski M.A. On effective transversely isotropic elasticity tensors based on Frobenius and L2 operator norms // Proceedings of Multivariate Approximation honoring Len Bos 60th birthday. – 2014. – P. 1–6.
70. Devroye L. Non-Uniform Random Variate Generation. – Springer, New York, 1986.
71. Eschner T., Funderberger J.J. Application of anisotropic texture components // Textures Microstruct. – 1997. – Vol. 28. – P. 181–195.
72. Esling C., Bechlerferry E., Bunge H.J. Numerical calculation of the odd part of the texture function // J. Phys. Lett. – 1981. – Vol. 42. – P. 141–144.
73. Ester, M.; Kriegel, H.-P.; Jörg, S.; Xu, X. A density-based algorithm for discovering clusters in large spatial databases with noise. // In: Proceedings of the 2nd ACM International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD), Portland, Oregon, 2–4 August 1996. – P. 226–231.
74. Ganapathysubramanian S., Zabaras N. Design across length scales: A reduced-order model of polycrystal plasticity for the control of microstructure-sensitive material properties // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. – 2004.– Vol. 193, No. 45–47. – P. 5017–5034.
75. Ganapathysubramanian S., Zabaras N. Modeling the thermoelastic-viscoplastic response of polycrystals using a continuum representation over the orientation space. Int. J. Plast. – 2005. – Vol. 21, No. 1, – P. 119–144.
76. Gazis D.C., Tadjbakhsh I., Toupin R.A. The elasticity tensor of a given symmetry nearest to an anisotropic elastic tensor // Acta Cryst. – 1963. – Vol. 16. – P. 917–922.
77. Gurtin M.E., Williams W.O., Ziemer W.P. Geometric measure theory and the axioms of continuum thermodynamics // Archive for Rational Mechanics and Analysis – 1986. – Vol. 92. – P. 1–22.
78. Habraken A. M. Modelling the plastic anisotropy of metals // Arch. Comput. Meth. Engng. – 2004. – Vol. 11, N 1. – P. 3–96.
79. Hastie. T. Tibshirani. R.. Friedman. J. The Elements of Statistical Learning. Data Mining, Inference, and Prediction (2nd ed.) – Springer, New York, 2009.

80. Heinz A., Neumann P. Representation of Orientation and Disorientation Data for Cubic, Hexagonal, Tetragonal and Orthorhombic Crystals // *Acta Cryst.* – 1991, – Vol. A47. – P.780–789.
81. Helming K., Eschner T. A new approach to texture analysis of multiphase materials using a texture component model // *Cryst. Res. Technol.* –1990. – Vol. 25. – P. 203–208.
82. Hertz H. Uber die Berührung fester elastischer Korper // *J. Reine Angew. Math.* – 1882 – Vol. 92. – P. 156–171.
83. Hu L., Rollet A.D., Iadicola M., Foecke T., Banovic S. Constitutive Relations for AA 5754 Based on Crystal Plasticity // *Met. Mater. Trans. A* – 2012. –Vol. 43. – P. 854–869.
84. Hyunh D.Q. Metrics for 3D Rotations: Comparison and Analysis // *J Math Imaging Vis.* – 2009. – Vol. 35. – P. 155–164.
85. Imhof J. Determination of an approximation of orientation distribution function using one pole figure // *Z. Metall.* – 1977. – Vol. 68. – P. 38–43.
86. Ivanova T.M., Savyolova T.I., Sypchenko M.V. The modified component method for calculation of orientation distribution function from pole figures // *Inverse Probl. Sci. Eng.* – 2010. – Vol. 18. – P. 163–171.
87. Jetter L.K., McHargue C.J., Williams R.O. Method of representing preferred orientation data analysis // *J. Appl. Phys.* –Vol. 27. – P. 368–374.
88. Kalidindi S.R., Houskamp J., Proust G., Duvvuru H. Microstructure Sensitive Design with First Order Homogenization Theories and Finite Element Codes // *Mater. Sci. Forum*, 2005.– Vol. 495–497. – P. 23–30.
89. Kalidindi S.R., Houskamp J.R., Lyons M., Adams B.L. Microstructure sensitive design of an orthotropic plate subjected to tensile load // *Int. J. Plast.*, 2004. – Vol. 20, No. 8-9. – P. 1561–1575.
90. Kaufman. L., Rousseeuw. P. *Finding Groups in Data: An Introduction to Cluster Analysis.* – John Wiley & Sons, Hoboken, NJ, USA, 1990.
91. Kochetov M., Slawinski M.A. On obtaining effective transversely isotropic elasticity tensors // *J. Elast.* – 2009. –Vol. 94. – P. 1–13

92. Kriegel, H.-P.; Kröger, P.; Jörg, S.; Arthur, Z. Density-based clustering. Wiley Interdiscip. Rev. Data Min. Knowl. Discov. – 2011, – Vol. 1, – P. 231–240.
93. Kroese D.P., Taimre T., Zdravko I.B., Handbook of Monte Carlo Methods. – Wiley, New York, 2011.
94. Kumar A., Dawson P. R. Modeling crystallographic texture evolution with finite elements over neo-Eulerian orientation spaces // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. – 1998. – Vol. 153. – P. 259–302.
95. Kunze K., Schaeben H. The Bingham distribution of quaternions and its spherical radon transform in texture analysis // Math. Geol. –2004. – Vol. 36. – P. 917–943.
96. Kuramae H., Sakamoto H., Morimoto H., Nakamachi E. Process metallurgy design for highformability aluminum alloy sheet metal generation by using two-scale FEM // Procedia Engineering. – 2011. – Vol. 10. – P. 2250–2255
97. Lebensohn R.A. N-site modeling of a 3D viscoplastic polycrystal using Fast Fourier Transform // Acta Mater. – 2001. Vol. 49. – P. 2723–2737.
98. Li B., Li P., Zhou R., Feng X.Q., Zhou K. Contact mechanics in tribological and contact damagerelated problems: A review // Tribology International. – 2022. – Vol. 171. – 107534.
99. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face – centered cubic crystal // J. Mech. Phys. Solids. – 1957. – Vol. 5, No. 1. – P. 143–149.
100. Lucke L., Pospiech J., Jura J., Hirsch J. On the presentation of orientation distribution functions by model functions // Z. Metall. – 1986. – Vol. 77. – P. 312–321.
101. Luecke K., Jura J., Pospiech J., Hirsch J.R. On the presentation of orientation distribution functions by model functions// Zeitschriftfür Met., 1986. – Vol. 77, No. 5. – P. 312–321.
102. Luecke K., Pospiech J., Virnich K.H., Jura J. On the problem of the reproduction of the true orientation distribution from pole figures// Acta Metall., 1981. – Vol. 29. – P. 167–185.
103. Luscher D.J., McDowell D.L. An extended multiscale principle of virtual velocities approach for evolving microstructure // Procedia Eng., 2009. – Vol. 1, No. 1, – P. 117–121.

104. Luscher D.J., McDowell D.L., Bronkhorst C.A. A second gradient theoretical framework for hierarchical multiscale modeling of materials.// *Int. J. Plast.*, 2010. – Vol. 26, no. 8. – P. 1248–1275.
105. Masimo M., Sachs G. O. Mechanische Eigenschaften von Messingkristallen // *Z. Physik.* – 1928. – B. 50. – S. 161–186.
106. Massart D.L., Plastria F., Kaufman L. Non-hierarchical clustering with MASLOC// *Pattern Recognit.*, 1983. – Vol. 16, no. 5. – P. 507–516.
107. Matthies S. Form effects in the description of the orientation distribution function (ODF) of texturized materials by model components // *Phys. Status Solidi*, 1982.– Vol. 112.– P. 705–716.
108. Matthies S. The ODF-Spectrum a New and Comprehensive Characterization of the Degree of Anisotropy of Orientation Distributions// *Mater. Sci. Forum*, 2005. – Vol. 495–497. – P. 331–338.
109. Matthies S., Vinel G.W. On the reproduction of the orientation distribution function of texturized samples from reduced pole figures using the conception of a conditional ghost correction,” *Phys. Status Solidi B.* – 1982. – Vol. 122, –P. K111–K114.
110. Matthies S., Vinel G.W. An example demonstrating a new reproduction method of the ODF of texturized samples from reduced pole figures // *Phys. Status Solidi B.* – Vol. 112. – P. 115–120.
111. McDowell D. L. Internal state variable theory // *Handbook of Materials Modeling* / Ed. S. Yip. –Springer, 2005. – P. 1151–1169.
112. McDowell D. L. Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials // *Mater. Sci. Eng. R.* –2008. – Vol. 62. – P. 67–123.
113. McDowell D.L., Olson G. B. Concurrent design of hierarchical materials and structures // *Sci.Model Simul.* – 2008. – Vol. 15, No 207. – 34 p.
114. Mingyan Sun, Qichao Fan, Yingying Wang, Qin Yang, Jie Chen, Shuke Huang, Yonghao Zhang 111<110> orientation induced anisotropy of shape memory effect in NiTiNb pipe joints // *Metals.* – 2020. –Vol. 10. – 776.

115. Moakher M., Norris A.N. The closest elastic tensor of arbitrary symmetry to an elasticity tensor of lower symmetry // *J. Elast.* – 2006. – Vol. 85, – P. 215–263
116. Morawiec A. Orientations and Rotations. Computations in Crystallographic Textures. – Springer: Berlin, 2004. – 200 p.
117. Nakamachi E., Kuramae H., Sakamoto H., Morimoto H. Process metallurgy design of aluminum alloy sheet rolling by using two-scale finite element analysis and optimization algorithm // *Int. J. Mech. Sci.* – 2010. – Vol. 52, No. 2. – P. 146–157
118. Needleman A., Asaro R. J., Lemonds J., Peirce D. Finite element analysis of crystalline solids // *Comp. Meth. Appl. Mech. Engng.* – 1985. – V. 52. – P. 689–708.
119. Noll W., Virga E.G. Fit regions and functions of bounded variation // *Archive for Rational Mechanics and Analysis.* – 1988. – Vol. 102. – P. 1–21.
120. Norris A.N. The isotropic material closest to a given anisotropic material // *Mater. Struct.* – 2006. – Vol. 1, No. 2, – P. 223–238.
121. Ostapovich K.V., Trusov P.V. An application of clustering techniques to reducing crystallographic texture data. // *AIP Conference Proceedings.* – 2020. – Vol. 2216. – 070003
122. Ostapovich K.V., Trusov P.V. Determination of deformation regimes for obtaining polycrystalline materials with rational textures by using multilevel inelasticity models // *AIP Conference Proceedings.* – 2020. – V. 2310. – 020236.
123. Ostapovich K.V., Trusov P.V. On using Monte-Carlo simulations for sampling crystallite orientations from given texture data // *Lobachevskii Journal of Mathematics.* – 2022. – Vol. 43, No. 7. – P. 1962–1975.
124. Ostapovich K.V., Trusov P.V. Reduced Statistical Representation of Crystallographic Textures Based on Symmetry-Invariant Clustering of Lattice Orientations // *Crystals.* – 2021. – Vol. 11. – 336.
125. Ostapovich K.V., Trusov P.V., and Yants A.Yu. Prediction of crystallographic texture formation in polycrystalline samples under severe plastic deformation based on a two-level statistical elasto-viscoplastic model // *Physical Mesomechanics.* – 2021. – Vol. 24, No. 3. – P. 225-236.

126. Ostapovich K.V., Trusov P.V., Yanz A.Yu. An algorithm for identifying texture components in the framework of statistical crystal plasticity models // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 581. – 012014.
127. Park F.C. Distance metrics on the rigid-body motions with applications to mechanism design. // ASME J. Mech. Des. – 1995. – Vol. 117. – P. 48–54.
128. Park F.C. Ravani B. Smooth invariant interpolation of rotations. // ACM Trans. Graph. – 1997. – Vol. 16. – P. 277–295.
129. Pawlik K., Pospiech J., Lucke K. The ODF approximation from pole figures with the aid of the ADC method // Textures Microstruct. – 1991 – Vol. 14, – P. 25–30.
130. Piero G. D. A new class of fit regions // Note di Matematica. –2007. – Vol. 27, No. 2. – P. 55–67.
131. Pore T., Thora S.G., Nema A.A. Review of contact modelling in nonlinear finite element analysis // Materials Today: Proceedings. – 2021. –Vol. 47, No. 10. – P. 2436–2440.
132. Pospiech J. Die Parameter der Drehung und die Orientierungsverteilungsfunktion (OVF) // Kristall und Technik. – 1972, – Vol. 7. – P. 1057–1072.
133. Proust G., Kalidindi S.R. Procedures for construction of anisotropic elastic-plastic property closures for face-centered cubic polycrystals using first-order bounding relations // J. Mech. Phys. Solids. – 2006. – Vol. 54, No. 8. – P. 1744–1762.
134. Puso M.A., Laursen T.A, Solberg J. A segment-to-segment mortar contact method for quadratic elements and large deformations // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. –2008. – Vol. 197, No.10. – P. 555–566.
135. Puso M.A., Laursen T.A. A mortar segment-to-segment contact method for large deformation solid mechanics // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. –2004. – Vol. 193. P. 601–629.
136. Raabe D., Roters F. Using texture components in crystal plasticity finite element simulations. // Int. J. Plast. – 2004. – Vol. 20. – P. 339–361.
137. Radon J.H. On the determination of functions from their integral values along certain manifolds // IEEE Trans. Med. Imaging. – 1986. – Vol. 5, No. 4. – P. 170–176.

138. Roters F, Eisenlohr P., Bieler T.R., Raabe D. Crystal Plasticity Finite Element Methods in Materials Science and Engineering. – WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010. – 209 p.
139. Roters F. Advanced Material Models for the Crystal Plasticity Finite Element Method: Development of a general CPFEM framework. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p.
140. Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications // *Acta Mater.* – 2010. – Vol. 58. – P. 1152–1211.
141. Ruer D., Baro R. Vectorial method of texture analysis of cubic lattice polycrystalline material // *J. Appl. Crystallogr.*, 1977. – Vol. 10. – P. 458–464.
142. Sachs G. Zur Ableitung einer Fließbedingung // *Z. Verein Deut. Ing.* – 1928. – B. 72. – S. 734–736.
143. Sam D., Onat, E., Etingof P., Adams B. Coordinate Free Tensorial Representation of the Orientation Distribution Function With Harmonic Polynomials // *Textures and Microstructures.* – 1993. – V. 21. – P. 233–250.
144. Schaeben H. van den Boogaart K.G. Spherical harmonics in texture analysis // *Tectonophysics* – 2003. – Vol. 370. – P. 253–268.
145. Schaeben H., Siemes H. Determination and interpretation of preferred orientation with texture goniometry: An application of indicators to maximum entropy pole- to orientation density inversion // *Math. Geol.* – 1996. – Vol. 28. – P. 169–201.
146. Sevostianov I., Kachanov M. On approximate symmetries of the elastic properties and elliptic orthotropy // *Int. J. Eng. Sci.* – Vol. 46, No. 3. – P. 211–223.
147. Signorini A. Questioni di elasticità non linearizzata o semilinearizzata e semilinearizzata // *Rend. Mat. e Appl.* – 1959. – Vol. 18, No. 1-2, – P. 95–139.
148. Signorini A. Sopra alcune questioni di elastostatica // *Atti Soc. Ital. Progr. Sci.* – 1933. – P. 513–533.
149. Silhavy M. General Cauchy fluxes // *Archive for Rational Mechanics and Analysis.* – 1985. – Vol. 90: – P 195-212.

150. Sundararaghavan V., Zabarar N. A dynamic material library for the representation of single-phase polyhedral microstructures. *Acta Mater.* – 2004. – Vol. 52, No. 14. – P. 4111–4119.
151. Sundararaghavan V., Zabarar N. A statistical learning approach for the design of polycrystalline materials // *Stat. Anal. Data Min.* – 2009. – Vol. 1, No. 5. – P. 306–321.
152. Sundararaghavan V., Zabarar N. On the synergy between texture classification and deformation process sequence selection for the control of texture-dependent properties // *Acta Mater.* – 2005. – Vol. 53, No. 4. – P. 1015–1027.
153. Sundararaghavan, V., Zabarar, N.: Design of microstructure-sensitive properties in elasto-viscoplastic polycrystals using multi-scale homogenization. // *Int. J. Plast.* – 2006. – Vol. 22, No. 10. – P. 1799–1824.
154. Suwas S., Ray R.K. *Crystallographic Texture of Materials.* – Springer: London, UK, 2014. – 260 p.
155. Tarasiuk J., Wierzbowski K. Baczmanski A. New algorithm of direct method of texture analysis // *Cryst. Res. Technol.* – 1998. – Vol. 33. – P. 101–118.
156. Taylor G.I. Plastic strain in metals // *J. Inst. Metals.* – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.
157. Truesdell C.A. *A First Course in Rational Continuum Mechanics V1.* (2nd ed.). – Academic Press – 388 p.
158. Trusov P.V., Ostapovich K.V. On elastic symmetry identification for polycrystalline materials // *Symmetry.* – 2017. – Vol. 9, No. 10. – 240.
159. Trusov P.V., Ostapovich K.V. On Implementing Boundary Conditions for a Rate-Form Quasi-Static Contact Problem with Friction: A Node-to-Facet Finite Element Approach // *Lobachevskii Journal of Mathematics.* – 2023. – Vol. 10, No. 23. – P. 4474–4488.
160. Trusov P.V., Ostapovich K.V. On the symmetry identification for the multi-level models of polycrystalline materials // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* – 2017. – Vol. 286. – 012032.
161. Vadon A., Heizmann J.J. A new program to calculate the texture vector for the vector method // *Textures Microstruct.* – 1991. – Vol. 14. – P. 37–44.

162. Van Houtte Crystal plasticity based modelling of deformation textures / Microstructure and Texture in Steels / Eds. A. Haldar, S. Suwas, D. Bhattacharjee. – Springer, 2009. – P. 209–224.
163. Van H.P. The use of a quadratic form for the determination of nonnegative texture functions // Textures Microstruct. – 1983. – Vol. 6. – P. 1–19.
164. Van Houtte, Li S., Seefeldt M., Delannay L. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel // Int. J. Plasticity. – 2005. – Vol. 21. – P. 589–624.
165. Wang F., Xu J.Z., Liang Z.D. Determination of the complete ODF of cubic system materials by the maximum-entropy method // Textures Microstruct. – 1992. – Vol. 19. – P. 55–58.
166. Wang F., Xu J.Z., Liang Z.D. Determination of the ODF of hexagonal symmetry materials according to the maximum-entropy method // Textures Microstruct. – 1989. – Vol. 10. – P. 217–226.
167. Williams R.O. Analytical methods for representing complex textures by biaxial pole figures // J. Appl. Phys. – 1968. – Vol. 39. – P. 4329–4335.
168. Zheng Q.-S., Spencer, A.J.M. Tensors which characterize anisotropies // International Journal of Engineering Science. – 1993. – Vol. 31, No. 5. – P. 679-693.
169. Ziemer W.P. Cauchy flux and sets of finite perimeter // Archive for Rational Mechanics and Analysis. – 1983. – Vol. 84. – P. 189-201.

Приложение

Зарегистрированные программы для ЭВМ

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО
о государственной регистрации программы для ЭВМ
№ 2021662416

«Программный модуль для послыной кластеризации кристаллографической текстуры по взвешенной выборке ориентаций кристаллитов (ПККТ)»

Правообладатель: *Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет» (ФГАОУ ВО «Пермский национальный исследовательский университет») (ФНП)*

Авторы: *Трусов Петр Валентинович (RU), Остапович Кирилл Вадимович (RU)*

Заявка № 2021661378
Дата поступления 19 июля 2021 г.
Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 28 июля 2021 г.

Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности

 Г.П. Низнев



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



СВИДЕТЕЛЬСТВО
о государственной регистрации программы для ЭВМ
№ 2023668203

«Пакет подпрограмм для генерации выборов ориентаций кристаллических решеток по набору полюсных фигур (срустех)»

Правообладатель: *Российская Федерация, от имени которой выступает Министерство науки и высшего образования Российской Федерации (RU)*

Авторы: *Трусов Петр Валентинович (RU), Остапович Кирилл Вадимович (RU)*

Заявка № 2023667569
Дата поступления 24 августа 2023 г.
Дата государственной регистрации в Реестре программ для ЭВМ 24 августа 2023 г.

Руководитель Федеральной службы по интеллектуальной собственности

 Ю.С. Зубов



документ государственной регистрации подписан
Сертификат электронной подписи
Электронная подпись
Действителен с 01.08.2024