

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

На правах рукописи

Грибов Дмитрий Сергеевич

**Физически-ориентированная трёхуровневая модель для исследования
неупругого деформирования поликристаллов: описание сложного
циклического нагружения материалов с различной энергией дефекта
упаковки**

1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный

доктор физико-математических наук,

руководитель

профессор Трусов Петр Валентинович

Пермь, 2022

Содержание

| | |
|---|----|
| Сокращения и основные обозначения | 4 |
| Список основных обозначений..... | 5 |
| Введение..... | 8 |
| Глава 1. Методы и результаты экспериментальных и теоретических исследований сложного нагружения металлов и сплавов | 15 |
| 1.1. Некоторые эффекты сложного нагружения, обнаруженные в механических испытаниях | 15 |
| 1.2. Анализ физических механизмов, обуславливающих эффекты сложного нагружения..... | 24 |
| 1.3. Существующие конститутивные модели для описания отклика материалов в условиях сложного деформирования | 30 |
| Глава 2. Концептуальная и математическая формулировка многоуровневых конститутивных моделей | 41 |
| 2.1. Обзор многоуровневых моделей | 43 |
| 2.2. Математическая формулировка базовой 2-хуровневой модели: соотношения, классификация переменных и параметров модели..... | 52 |
| Глава 3. Структура трехуровневой дислокационно-ориентированной модели | 56 |
| 3.1 Концептуальная постановка подмодели мезоуровня-2..... | 58 |
| 3.2 Уравнения для описания эволюции внутренних переменных мезоуровня-2 | 61 |
| 3.3. Формирование барьеров на расщеплённых дислокациях; дислокационно-ориентированный закон упрочнения | 65 |
| 3.4 Алгоритм реализации модели..... | 74 |
| Глава 4. Описание и анализ результатов моделирования сложного монотонного и циклического деформирования поликристаллических образцов..... | 79 |
| 4.1 Идентификация разработанной модели..... | 79 |

| | |
|--|-----|
| 4.2 Описание и анализ результатов численных экспериментов: исследование нагружения образцов по простым и сложным циклическим траекториям деформации..... | 82 |
| Заключение | 98 |
| Список литературы | 100 |

Сокращения и основные обозначения

ГЦК (решетка) – гранецентрированная кубическая (решетка)

ДЦУ – дополнительное циклическое упрочнение

ИПД интенсивной пластической деформации

КМ – конститутивная модель

ЛСК – лабораторная система координат (единая для всех конфигураций декартова ортогональная система координат)

МДТТ – механика деформируемого твердого тела

МСС – механика сплошных сред

НДС – напряженно-деформированное состояние

ОС – определяющие соотношения

ПСК – подвижная система координат

ПКА поликристаллический агрегат

ПО – представительный объем

СК – система координат

СС – система скольжения

ЭДУ – энергия дефекта упаковки

ФТП – физические теории пластичности

Список основных обозначений

γ, γ_m – сдвиговые деформации и их максимальная амплитуда

$\varepsilon, \varepsilon_m$ – продольные деформации и их максимальная амплитуда

ρ – степень непропорциональности нагружения

ϕ – угол рассогласования по фазам деформирования сдвиг–растяжение

x_d – ширина расщепления краевой дислокации

$\gamma_{дв}$ – величина энергии дефекта упаковки

G – модуль Юнга

ν – коэффициент Пуассона

b – длина вектора Бюргера

$\mathbf{J}_\beta^e, \mathbf{J}_\gamma^i$ – внутренние явные и неявные переменные

$\hat{\nabla} \mathbf{V}$ – градиент скорости перемещений макроуровня

Σ – тензор напряжений Коши макроуровня

Π – тензор модулей упругости на макроуровне

$\mathbf{Z}, \mathbf{Z}^{in}$ – мера скорости деформации, её упругая и неупругая составляющая (макроуровень)

Ω – спин жесткой подвижной системы координат (ПСК) макроуровня

$\hat{\nabla} \mathbf{v}$ – транспонированный градиент скорости перемещений на мезоуровне

$\mathbf{z}^e, \mathbf{z}^{in}$ – мера скорости деформации на мезоуровне: упругая и неупругая составляющая

σ – тензор напряжений Коши на мезоуровне

$\tau^{(k)}$ – величина касательных напряжений на k -й системе скольжения

$\mathbf{b}^{(k)}$ – единичный вектор в направлении вектора Бюргерса k -й системы скольжения

$\mathbf{n}^{(k)}$ – единичный вектор в направлении вектора нормали k -й системы скольжения

$\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорости сдвигов по k -й системе скольжения

$\rho_+^{(k)}, \rho_-^{(k)}$ – плотности дислокаций на k -й системе скольжения

$V^{(k)}$ – средние скорости движения дислокаций на k -й системе скольжения

θ – температура

$\rho_{bar}^{(kl)}$ – плотности барьеров на пересечениях k -й и l -й систем скольжения

\mathbf{R}_{bar}^{kl} – матрица, определяющая возможность образования барьеров Ломера–Коттрелла и Хирта на пересечении k -й и l -й систем скольжения

$\mathbf{m}_{(S)}^{(i)}$ – симметричная часть ориентационного тензора i -й системы скольжения

$\tau_{c\pm}^{(k)}, \tau_{c_dis\pm}^{(k)}, \tau_{c_bar\pm}^{(k)}, \tau_{c_lat}^{(k)}$ – критические напряжения, составляющие критических напряжений за счёт дислокаций, барьеров, сопротивления решётки на k -й системе скольжения

$\Delta F_*^{(k)}, \Delta G_*^{(k)}$ – энергии активации движения дислокаций по k -й системе скольжения

k_B – константа Больцмана

$l^{(k)}$ – средняя длина свободного пробега дислокации на k -й системе скольжения

ν – дебаевская частота

$\rho_{src}^{(k)}, \rho_{0src}$ – плотность источников Франка–Рида k -й системы скольжения и их начальное значение

r_{av} – средний радиус петли

r_0 – минимальная длина закрепленного сегмента, способного генерировать дислокационные петли

$\dot{\rho}_{nuc}^{(k)}$ – скорость изменения плотностей дислокаций на k -й системе скольжения за счёт работы источников

$\dot{\rho}_{\pm}^{(k)ann}$ – скорость изменения плотностей дислокаций на k -й системе скольжения за счёт аннигиляции

M^{ki} – матрица, определяющая силу взаимодействия дислокаций k -й и i -й систем скольжения

Индекс «г» – означает независящую от выбора системы отсчета (коротационную) производную

$\langle A \rangle$ – операция осреднения по объему параметра A

$H(\cdot)$ – функция Хэвисайда

$\langle x \rangle = xH(x)$ — оператор (скобки Маколея)

Введение

Разработка режимов термомеханической обработки металлов и сплавов в настоящее время невозможна без создания математических моделей, позволяющих с необходимой точностью получать изделия с требуемыми эксплуатационными свойствами. В постановках возникающих при этом краевых задач механики деформируемого твердого тела основными, главным образом влияющими на адекватность моделей, являются определяющие соотношения (или конститутивные модели (КМ) материала). Следует отметить, что значительная часть моделей для описания процессов термомеханической обработки и в настоящее время в качестве последних использует макрофеноменологические определяющие соотношения [36, 13, 15, 23, 7, 11, 20, 4, 17]. Однако определяющие соотношения (ОС) данного класса не обладают универсальностью, не позволяют выявить и объяснить физические механизмы, реализующие процессы деформирования. При этом данные ОС устанавливают связи между макропараметрами, что с учетом свойства памяти деформируемых твердых тел приводит к необходимости их формулировки в виде сложных тензорзначных операторов, для идентификации параметров которых требуется проведение большого числа дорогостоящих экспериментов на сложное нагружение для каждого исследуемого материала. В связи с этим всё более широкое распространение в последние 15-20 лет получают конститутивные модели, основанные на введении внутренних переменных, использующие многоуровневые подходы и физические теории пластичности [34]. Модели данного класса ориентированы на явное описание эволюционирующей структуры, определяющей решающим образом физико-механические свойства материалов и рабочие характеристики конструкций. В процессах обработки, в большинстве случаев осуществляемых методами неупругого деформирования, материалы испытывают, как правило, сложное монотонное и/или циклическое нагружение. Отдельный интерес представляет описание сложного циклического нагружения материалов с низкой энергией дефекта

упаковки (ЭДУ), сопровождаемого существенным ростом предела текучести – дополнительного циклического упрочнения (ДЦУ) [49]. Использование таких нагрузений на финишных операциях изготовления деталей (обкатка роликами, обдувка дробью, рихтовка арматурной проволоки и т.д.) позволяют значительно повысить эксплуатационных характеристики изделий.

В настоящее время существует большое число работ, включающих экспериментальные исследования с анализом микроструктуры и построение макрофеноменологических моделей для описания сложного циклического деформирования; значительных успехов в данной области достигли многие исследователи (A. Benallal, V. Doquet, H.S. Lamba, K.C Valanis, C. Beradai, C. Laird, J.P. Dingli, P. Li, Y. Jiang, Y. Ohashi, E. Krempl, T. Itoh и др.). Известные экспериментальные данные свидетельствуют о нетипичном отклике материалов с низкой ЭДУ на сложное циклическое деформирование: в этом случае имеет место существенное (десятки процентов) ДЦУ, не наблюдаемое для исследуемых материалов при простых (пропорциональных) циклических нагрузениях. Исследователи связывают данный факт с большим числом активируемых систем скольжения и взаимодействием дислокаций пересекающихся систем скольжения, что приводит к образованию развитой системы внутризёренных дефектов. Следует подчеркнуть, что в используемых указанными авторами макрофеноменологических ОС структура материалов в явном виде не рассматривается.

Как отмечено выше, в настоящее время активно развивается подход, использующий явное описание физических механизмов неупругого деформирования и их носителей (дефектов различных структурно-масштабных уровней), обуславливающих изменения свойств материалов. Такие модели в большинстве случаев включают в себя подмодели нескольких структурно-масштабных уровней и позволяют с различной степенью детализации (в зависимости от поставленной задачи и используемого аппарата) описать эволюцию материала. Значительных

успехов в построении данного класса КМ достигли многие исследователи (Р.Р. Балохонов, А.В.Вахрушев, А.Е.Волков, А.М.Кривцов, В.А. Лихачёв, В.Е. Панин, В.А.Романова, П.В.Трусков, А.И. Швейкин, D.L. McDowell, J. Bishop, T.G. Lin, F. Roters, M. Knezevic, B. Devincere, A. Ma и др.). Модели данного класса основаны на введении внутренних переменных (ВП), подразделяемых на явные и неявные; явные непосредственно входят в структуру собственно ОС данного уровня; к неявным относятся переменные, описывающие структуру на более глубоких структурно-масштабных уровнях и входящие в качестве переменных в эволюционные уравнения данного уровня. К преимуществам таких моделей можно отнести их значительную универсальность, применимость для широких классов материалов и воздействий [108]. В то же время данные КМ позволяют учитывать особенности физических механизмов неупругого деформирования, к числу которых относятся различия в характере эволюции дислокационных субструктур в материалах с различной энергией дефекта упаковки.

Следует отметить, что в существующих моделях особенностям поведения материалов с низкой ЭДУ при сложном циклическом деформировании не уделено должного внимания. Учитывая теоретическую и практическую важность исследования процессов сложного нагружения (в том числе – циклического), выбранную тему исследования можно считать актуальной.

Цель работы.

Целью работы является развитие двухуровневой модели, основанной на физической теории упруговязкопластичности, введением дополнительного структурного уровня для описания эволюции дефектной субструктуры при исследовании упругопластического деформирования поликристаллических металлов и сплавов при произвольных (в том числе – сложных циклических) нагружениях. Разрабатываемая модель базируется на явном описании дефектов кристаллической решётки и механизмов их

эволюции: генерации и взаимодействия (включая аннигиляцию) дислокаций, формирования барьеров на расщеплённых дислокациях.

Задачи:

- анализ основных физических механизмов и их носителей, выделение наиболее важных с точки зрения описания эффектов сложного нагружения механизмов и характеристик материалов;
- формулировка законов упрочнения на основе рассмотрения взаимодействия дислокаций и барьеров на СС;
- разработка трёхуровневой конститутивной модели для анализа неупругого деформирования материалов при термомеханических воздействиях, основанной на явном описании эволюции плотностей дефектов на системах скольжения;
- идентификация и верификация модели, включающая проведение численных экспериментов для различных процессов деформирования материалов с разными величинами ЭДУ;
- проведение численных экспериментов, анализ влияния различных механизмов на эволюцию плотностей дефектов разного рода и изменение физико-механических свойств материалов.

Научная новизна заключается в:

- модификации двухуровневой конститутивной модели за счет введения дополнительного структурного уровня для описания эволюции плотностей дефектов;
- построении замкнутой системы эволюционных соотношений для описания изменения плотностей дефектов;
- введении в модель явного описания реакций по образованию барьеров Ломера – Коттрелла и Хирта на расщеплённых дислокациях;
- формулировке закона упрочнения, включающего учёт взаимодействия дислокаций с барьерами различной природы;

- получении с использованием разработанной модели новых результатов, позволяющих объяснить физическую природу явления дополнительного циклического упрочнения в материалах с низкой ЭДУ.

На защиту выносятся:

- трёхуровневая упруговязкопластическая модель, включающая явное описание эволюции плотностей дефектов;
- закон упрочнения, позволяющий учесть формирование и разрушение барьеров на расщеплённых дислокациях;
- алгоритм реализации трёхуровневой модели, процедуры и результаты идентификации и верификации;
- результаты численного моделирования материалов с разной ЭДУ по сложным (в том числе – циклическим) траекториям.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из списка сокращений и обозначений, введения, 4 глав, заключения, списка использованной литературы. Работа содержит 26 рисунков, библиографический список – 137 наименований, изложена на 111 страницах.

Краткое содержание работы

Во введении обосновывается актуальность и научная новизна диссертационного исследования, обсуждаются возможные сферы применения результатов работы, формулируются цель и задачи работы, приводится краткое содержание работы по главам.

В первой главе рассмотрены имеющиеся в литературе экспериментальные данные, основные физические механизмы изменения микроструктуры при деформировании материалов с различной энергией дефекта упаковки, существующие модели для описания процессов пластического формоизменения поликристаллических металлов и сплавов (в том числе – при сложном нагружении).

Во второй главе приведены концептуальная и математическая постановка задачи разработки многоуровневой КМ, основное внимание уделено рассмотрению базовой 2-хуровневой (макро- и мезоуровень-1) упруговязкопластической модели. Элементом мезоуровня-1 является кристаллит (зерно, субзерно), объектом исследования на макроуровне – представительный макрообъем.

В третьей главе представлена структура модификации базовой модели – трехуровневой дислокационно-ориентированной модели для описания упругопластического деформирования поликристаллов, ее математическая формулировка и алгоритмы реализации.

В четвёртой главе приведены описание и анализ результатов моделирования сложного монотонного и циклического деформирования поликристаллических образцов, произведена оценка адекватности модели на основе сопоставления теоретических и экспериментальных данных по исследованию деформирования образцов из разных материалов при различных нагрузениях. С использованием численных экспериментов осуществлена проверка способности модели описывать явления, наблюдаемые при циклическом нагружении (выход амплитуд напряжений на стационарные значения при циклических нагружениях с фиксированными амплитудами деформаций, явление ДЦУ, увеличение плотностей дефектов с одновременным появлением барьеров на расщеплённых дислокациях).

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

Достоверность результатов подтверждается удовлетворительным соответствием между результатами расчета, полученными с использованием разработанной модели, и известными экспериментальными данными.

Практическая ценность работы заключается в возможности применения предлагаемой модели (включая разработанную программу реализации

модели) для анализа эволюционирующей дефектной микроструктуры (плотности дислокаций по системам скольжения, плотности барьеров Ломера – Коттрелла и Хирта, плотности источников дислокаций) при исследовании процессов термомеханической обработки металлов и сплавов.

Глава 1. Методы и результаты экспериментальных и теоретических исследований сложного нагружения металлов и сплавов

В реальных процессах обработки металлов и сплавов методами интенсивной пластической деформации (ИПД) реализуются, как правило, весьма сложные траектории деформации различных частей обрабатываемых изделий. В связи с этим результаты экспериментов на сложное монотонное и непропорциональное циклическое деформирование металлов представляют большой интерес; при таких программах деформирования формируются структуры и свойства материалов, которые невозможно получить при простом нагружении.

1.1. Некоторые эффекты сложного нагружения, обнаруженные в механических испытаниях

В экспериментах на сложное нагружение наблюдается несоосности девиатора напряжений девиатору скоростей деформаций сразу после смены программы нагружения, обусловленное наличием памяти; при этом после пластического деформирования по прямолинейной траектории в пространстве деформаций (т.е. простого нагружения) девиаторы снова становятся соосными [16, 125], что объясняется затуханием памяти. Данное явление связывается с перестройкой мезо- и микроструктуры, вследствие чего материал в текущей конфигурации сохраняет память о ранее происходивших воздействиях. В экспериментах на двухзвенных траекториях наблюдается уменьшение интенсивности напряжений – «нырок» до 10% (величина различна для материалов и угла излома траектории) [42, 87]. С различными эффектами, проявляемыми образцами из металлов и сплавов при сложном нагружении, можно познакомиться в многочисленных публикациях, в которых приведены результаты таких испытаний [5, 6, 1, 12, 10].

В части работ, описывающих эксперименты на сложное деформирование, авторы отмечают связь величины ЭДУ исследуемых материалов и интенсивности упрочнения: для материалов с низкой ЭДУ

характерно более активное упрочнение по сравнению с материалами с высокой ЭДУ при одинаковых программах деформирования.

При пластическом деформировании кристаллических материалов наблюдается увеличение предела текучести, связываемое большинством исследователей с существенной перестройкой дефектных структур внутри зёрен. При низкой ЭДУ дислокации находятся в расщепленном состоянии, что при множественном скольжении приводит к образованию барьеров на расщепленных дислокациях и накоплению поджатых дислокаций, что ведет к увеличению предела текучести [60, 68].

Отдельного внимания заслуживает рассмотрение поведения материалов при немономонном (в том числе – циклическом) нагружении, реализуемом в финишных операциях (обкатка роликами, обдувка дробью и т.д.) многих процессов обработки металлов и сплавов. В работах [71, 72] представлены результаты экспериментов на циклическое деформирование образцов из чистой и легированной меди при различных температурах. Рассматривались закономерности выхода на установившуюся петлю гистерезиса при циклическом пропорциональном нагружении. В случае предварительного пластического деформирования отмечено смещение петли гистерезиса в направлении предварительного деформирования, для материалов с низкой энергией дефекта упаковки данный эффект проявляется более интенсивно. Приведены также данные анализа микроструктуры образцов после циклического деформирования. Отмечено образование дислокационных стенок для чистой меди, а также образование полос скольжения для сплава медь – 7.5% алюминий. На основании исследования микроструктуры было сделано предположение о наличии аккомодационного механизма накопления и сброса накопленной энергии путём увеличения и сжатия дислокационных петель при циклическом нагружении.

Работа [97] посвящена рассмотрению результатов экспериментов на медных (с относительно низкой ЭДУ) образцах. В работе отмечен выход на установившийся цикл кривой напряжения – деформация при циклическом

нагрузении образцов из чистой меди. Образцы подвергались деформированию по циклическим простым и сложным траекториям, наблюдалось явление ДЦУ. Особое внимание уделяется восстановлению установившегося циклического режима при простом нагружении, следующем за этапом сложного циклического нагружения, что указывает на затухающую память материала.

В работе [96] представлены результаты экспериментов по деформированию образцов из меди и сплава меди с алюминием при циклическом нагружении. Основной целью экспериментов было исследование накопления дефектов, приводящее к образованию ячеистой структуры в кристаллитах и дальнейшему разрушению. Приведены и описаны этапы формирования и эволюции микроструктуры в ходе циклического деформирования, в том числе – начальный период, при котором происходило образование барьеров на расщеплённых дислокациях и накопление поджатых на барьерах дислокаций.

В работах Беналляля и соавторов [48, 49, 50] приведены результаты ряда экспериментов на простое (пропорциональное) и сложное (непропорциональное) циклическое деформирование в двухмерном пространстве деформаций – напряжений (осевые растяжение – сжатие и кручение тонкостенных трубчатых образцов), исследуемые материалы – нержавеющая сталь 316 и сплав алюминия 2024. Используемые траектории деформации приведены на рис. 1.1: а – растяжение – сжатие; б – растяжение – сжатие с одновременным кручением; в, г – пилообразные траектории, растяжение сменяется кручением, число зубцов варьировалось; д, е – последовательное растяжение – сжатие и кручение с промежуточным реверсивным деформированием, между лучами углы в 90° и 45° ; ж – растяжение – сжатие с кручением по замкнутой траектории в форме квадрата; з – одновременное растяжение и кручение по замкнутой траектории в форме эллипса. Образцы были отожжены перед деформированием, микроструктура материалов не анализировалась. Приведено описание явления

дополнительного циклического упрочнения, эффекты разупрочнения при смене программы нагружения со сложного на простое и перекрестного упрочнения. В работе отмечено известное из ранее проведенных эмпирических исследований явление – переход зависимостей напряжений от деформаций на установившиеся траектории при фиксированных амплитудах пластических деформаций после 20-40 циклов (приспособляемость материала к программе нагружения). Также в работе описаны результаты экспериментов на циклическое простое и сложное нагружение, приведены значения пределов текучести после деформирования по различным программам нагружения.

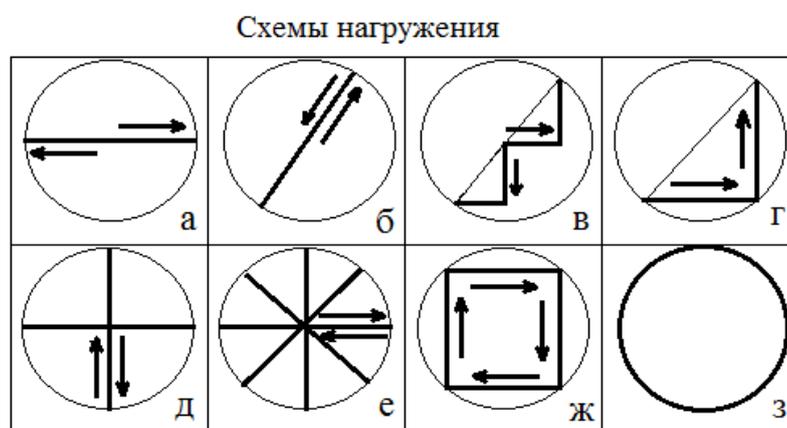


Рисунок 1.1. Схематическое изображение программ деформирования для экспериментов на циклическое деформирование [48]

Дополнительным циклическим упрочнением (ДЦУ) называется повышение предела текучести материала после сложного (непропорционального) циклического деформирования по сравнению с пределом текучести, получаемым после опытов на простое (лучевое, пропорциональное) циклическое нагружение с теми же амплитудными значениями интенсивностей деформации. Процессы сложного циклического деформирования в общем случае – процессы с траекторией деформации в форме произвольной замкнутой кривой в пространстве деформаций (мера сложности нагружения не обсуждается). В цитируемых работах при испытаниях тонкостенных трубчатых образцов для анализа явления ДЦУ

использовались две моды деформирования: знакопеременное кручение (со сдвиговыми деформациями γ) и растяжение – сжатие (с продольной деформацией ε), при постоянных для каждого испытания амплитудах γ_m и ε_m , с одинаковой частотой ω , но с рассогласованием по фазе на произвольный угол ϕ :

$$\begin{aligned} \gamma &= \gamma_m \sin(\omega t + \phi), \\ \varepsilon &= \varepsilon_m \sin(\omega t), \\ \rho &= \frac{\gamma_m}{\sqrt{3} \varepsilon_m}. \end{aligned} \quad (1.1)$$

При циклических нагружениях с фиксированным законом изменения деформации после нескольких циклов напряженное состояние также выходит на установившийся циклический режим с постоянными значениями амплитуды компонент напряжений σ_m и τ_m . Величина дополнительного упрочнения зависит от параметров процесса ρ и ϕ (Таблица 1.1) и может достигать десятков процентов (рис.1.2).

Таблица 1.1 Программы нагружения в натурном эксперименте на циклическое непропорциональное деформирование [50]

| № | ϕ | ρ |
|---|--------|--------|
| 1 | 33 | 0.25 |
| 2 | 33 | 0.5 |
| 3 | 33 | 0.66 |
| 4 | 33 | 1 |
| 5 | 45 | 1 |
| 6 | 40 | 1 |
| 7 | 92 | 1 |

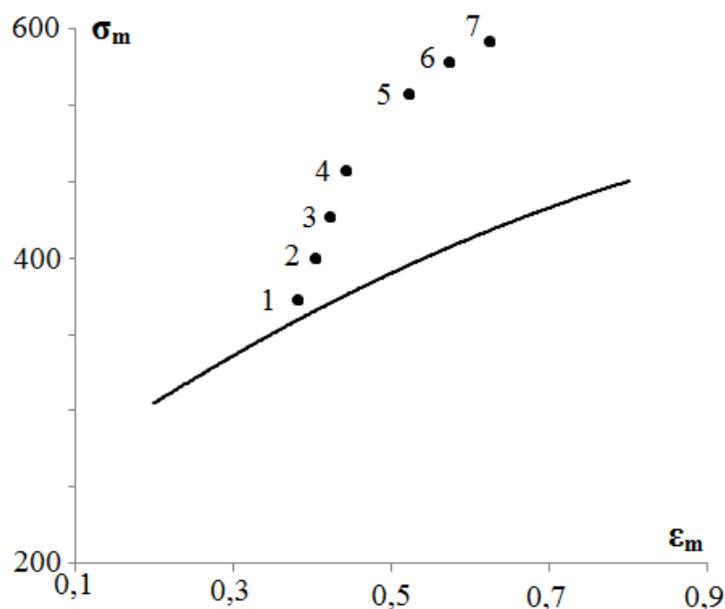


Рисунок 1.2. Зависимость амплитудных значений интенсивности напряжений от амплитуды пластических деформаций для семи экспериментов (точки 1-7, номера соответствуют программам, приведенным в таблице, φ – угол сдвига фазы между модами деформации) в сравнении с одноосным нагружением (сплошная кривая) [48]

В цитируемых работах отмечено наблюдаемое в экспериментах разупрочнение (снижение предела текучести) при смене программы циклического нагружения с непропорционального на пропорциональное, и эффект перекрёстного упрочнения – увеличение предела текучести при смене траектории сложного циклического нагружения. Показано также повышение предела текучести на 15% при смене нагружения с растяжения – сжатия на знакопеременное кручение для стали, т.е. ДЦУ возникает, хотя и в меньшей степени, при последовательных отличающихся друг от друга простых циклических нагружениях [122]

В работе [126] рассмотрены результаты экспериментов, полученные на образцах из сталей 18Г2А и 2CrMoV57. Программы кинематического нагружения включали простой сдвиг, кручение, циклический сдвиг, циклическое кручение и растяжение – сжатие. Образцы нагружали монотонно и циклически с постоянной интенсивностью скорости

деформации при фиксированных амплитудах компонент задаваемых деформаций и комнатной температуре. В работе отмечены следующие основные результаты: при простом циклическом нагружении выход на стационар при циклическом нагружении устанавливается при первом цикле, а затем он незначительно изменяется, не наблюдается расширения петли гистерезиса. Значения максимальных (по модулю) напряжений петли гистерезиса зависят от амплитуды пластической деформации. В экспериментах отмечено явление ДЦУ (при деформировании по круговым траекториям в пространстве деформаций).

В статье [68] рассматривалось пропорциональное и непропорциональное циклическое деформирование стальных образцов. Проведен анализ напряжённого состояния и исследована структура образцов. Анализ поверхности показал, что непропорциональное нагружение создает более однородное скольжение в разных зёрнах, чем пропорциональное; отмечено также, что непропорциональное нагружение увеличивает количество активных систем скольжения. Результаты удовлетворительно согласуются с данными работ группы Беналляля.

В работе [135] анализируются результаты испытания на двухосное деформирование тонкостенных круглых цилиндрических образцов из низколегированной углеродистой стали. Рассматривались непропорциональные циклические нагружения, растяжение и кручение изменялись по гармоническому закону от времени. Изучалось влияние амплитуды деформации и фазового угла (меры непропорциональности траектории деформации). При анализе результатов эксперимента отмечено проявление анизотропии и явление ДЦУ, возникающее в результате непропорционального циклического деформации. Представлена конститутивная модель, описывающая с приемлемой точностью поведение материала при сложных историях нагружения, включая циклическую деформацию.

В работе [69] обсуждаются результаты испытаний образцов из материала с низкой энергией дефекта упаковки (сплав кобальт – 33% никель). ДЦУ, возникающее в этом материале при непропорциональном циклическом нагружении трубчатых образцов на растяжение – кручение, очень существенно и достигает десятков процентов. Основное внимание в работе уделено физическому объяснению образования в процессе деформирования двойников. Образование двойников требует повышенных действующих напряжений, что достигается благодаря предварительному этапу формирования микроструктуры. По мнению авторов, после образования барьеров Ломера–Коттрелла происходит блокирование скольжения по многим системам скольжения, что приводит к существенному повышению критических напряжений сдвига. При проведении испытаний на растяжение и кручение при самых малых диапазонах изменения деформации отмечалось ускорение циклического упрочнения после 6-10 циклов, когда уровни напряжений достигали 180-200 МПа (для материала без упрочнения предел текучести равен 100 МПа), что связывается с ранним образованием двойников.

В работе [57] представлены и анализируются результаты экспериментальных исследований по деформированию образцов из аустенитной нержавеющей стали 316 при комнатной температуре в условиях непропорциональных циклических деформаций при растяжении-кручении. Основное внимание уделяется явлению ДЦУ в условиях сложного нагружения. Представлена классификация различных видов нагружения. В работе исследуются дислокационные субструктуры, отмечается образование различных видов структур. Анализ этих микроструктур показал, что ДЦУ связано с множественным скольжением (скольжение происходит по большому числу СС), а также развитию неоднородных субструктур.

В [88] рассмотрены ключевые черты деформирования металлов в условиях циклического нагружения. Выделяются следующие основные эффекты: эффект Баушингера, циклическое упрочнение и разупрочнение,

эффект повышения предела пластичности при смене программы нагружения, ДЦУ. Циклическое упрочнение существенно зависит от амплитуды нагрузки и предыстории деформирования. Экспериментальные данные позволяют сделать вывод о том, что все рассматриваемые в работе виды упрочнения (циклическое упрочнение, дополнительное циклическое упрочнение и деформационное упрочнение) носят изотропный характер.

В [99] на основе анализа результатов экспериментов на циклическое деформирование предложена систематизация материалов с гранецентрированной кубической решеткой (ГЦК), включая медь, никель, серебро, а также медно-алюминиевые и медно-цинковые сплавы. Основными факторами, определяющими характер деформирования, были выделены ЭДУ и начальные критические напряжения.

В статье [59] рассмотрен отклик образцов из углеродистой стали 20 при нагружении в условиях растяжения – сжатия и знакопеременного кручения. Деформирование задавалось мягким образом (с контролем усилий и моментов), по трем траекториям деформирования с частотой 0,1 Гц с (1200 циклов нагружения). Отмечена чувствительность материала к типу нагружения. Авторы отмечают увеличение ширины петель упругопластического гистерезиса в условиях растяжения – сжатия при достижении периодичности траектории деформации, отражающее адаптацию материала к программе нагружения.

Суммируя вышеизложенное, можно отметить следующие особенности отклика материалов с низкой ЭДУ: данный класс материалов склонен к образованию барьеров на расщеплённых дислокациях, что ведёт к существенному повышению напряжения течения (упрочнению), причём чем выше степень непропорциональности и амплитуда деформаций – тем эффект более сильно выражен.

1.2. Анализ физических механизмов, обуславливающих эффекты сложного нагружения

Наиболее значимым механизмом неупругого деформирования является движение краевых дислокаций. Известно, что пластическое деформирование обычно сопровождается увеличением плотности дислокаций по СС. В качестве внутризеренных источников дислокаций рассматриваются источники Франка-Рида, генерирующие замкнутые расширяющиеся петли дислокаций [35, 38, 22]. Работа источника Франка-Рида стала одним из первых открытых механизмов, описывающих увеличение плотностей дислокаций. Источник Франка-Рида образует сегмент дислокации, закрепленный в двух точках непреодолимыми барьерами; при повышении касательных напряжений происходит выгибание дислокации и генерируется расширяющаяся дислокационная петля (рис. 1.3).

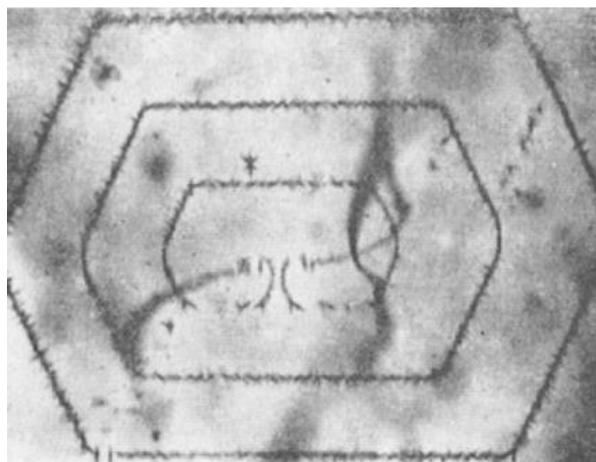


Рисунок 1.3. Источник и петли дислокаций [86]

Из экспериментов известно, что источник может генерировать ограниченное число петель; это может быть связано с тем, что генерируемые петли упираются в преграду, упругими полями компенсируя действующие напряжения на последующих петлях, вплоть до самого источника, выключая его. Расширение петли ведёт к увеличению плотности дислокаций, сегменты петли могут вступать в дислокационные реакции, а в материалах с низкой ЭДУ дислокации, образующие петли, могут расщепляться в процессе скольжения.

Вектор Бюргера дислокаций, составляющих петлю, совпадает с вектором Бюргера дислокации, образовавшей петлю. Дислокационная петля состоит из четырёх сегментов, двух краевых и двух винтовых, сегменты винтовых дислокаций при этом имеют разные знаки (Рис.1.4).

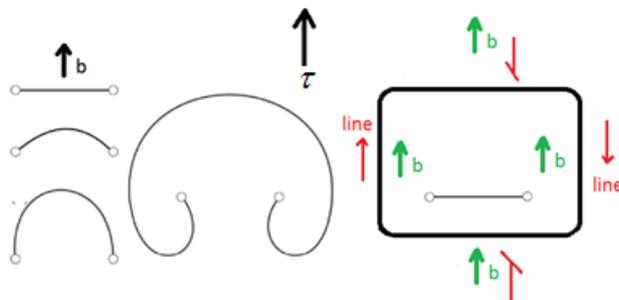


Рисунок 1.4 Схематическое изображение работы источника

В настоящей работе для описания размножения дислокаций вводятся плотности источников Франка-Рида $\rho_{src}^{(k)}$ на системах скольжения. Плотность источников имеет размерность m^{-3} и определяет количество источников на системе скольжения в единице объема. До достижения критических напряжений работы источника генерации новых петель не происходит; критическое напряжение определяется следующим соотношением [19]:

$$\tau_{F-R} = \frac{a\mu b}{R_s}, \quad (1.2)$$

где μ – модуль сдвига, R_s – среднее расстояние между барьерами, закрепляющими дислокации в источниках (зависит от плотности дефектов), b – модуль вектора Бюргера, a – безразмерный параметр. Скорость генерации петель зависит от количества источников, выполнения критерия активации источника и времени восстановления источника, зависящего от действующих напряжений.

Аннигиляция дислокаций происходит в результате реакции пар дислокаций одной СС с противоположно направленными экстраплоскостями (в терминах модели – положительная и отрицательная дислокации) (рис. 1.5):

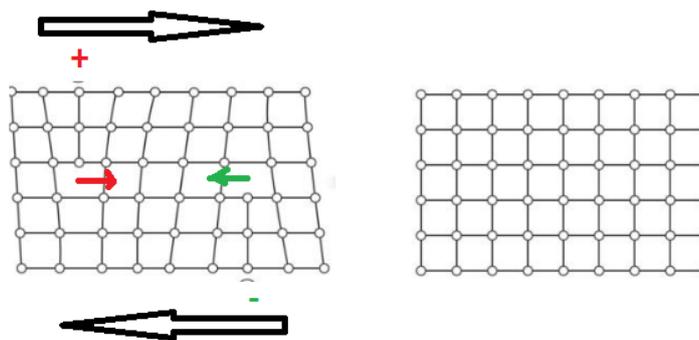


Рисунок 1.5. Аннигиляция дислокаций

Данная реакция возможна в случае, если плоскости скольжения двух одинаковых дислокаций противоположных знаков расположены на расстоянии, не превышающем некоторое критическое значение (зависит от решетки и температуры). Аннигиляция дислокаций наиболее часто наблюдается в экспериментах на реверсивное нагружение. Дислокации разных знаков одной системы скольжения притягиваются; при нахождении дислокаций на параллельных системах скольжения они могут переползти в направлении друг к другу, аннигилируя при сближении на расстояние аннигиляции h_{ann} . Количество прореагировавших дислокаций пропорционально заметаемому объёму и плотности дислокаций на системах скольжения.

Реакции на расщепленных дислокациях

В материалах с низкой энергией дефекта упаковки часто происходит расщепление полных дислокаций на две частичные и двумерный дефект упаковки (область нарушения периодичности решетки) между ними. Ширина расщепления может варьироваться (в зависимости от конкретного материала, действующих напряжений и температуры) и для некоторых материалов и условий может достигать десятков межатомных расстояний. Такие дислокации способны скользить как полные, однако при встрече двух расщепленных дислокаций из пересекающихся систем скольжения могут происходить дислокационные реакции.

В ходе реакций на расщепленных дислокациях могут образовываться устойчивые структуры – барьеры скольжению. Самые сильные барьеры в

кристаллах с ГЦК решеткой – барьеры Ломера – Коттрелла, образуемые двумя частичными (δA и $D\alpha$) и одной вершинной ($\alpha\delta$) дислокациями (Рис.1.6).

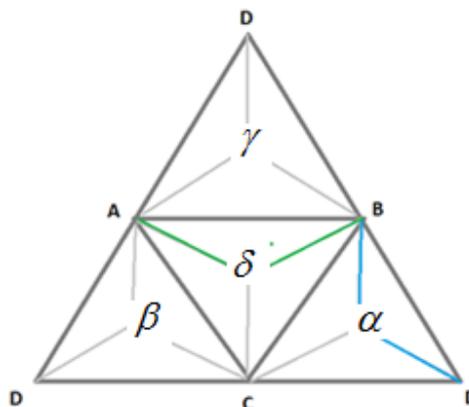


Рисунок 1.6. Тетраэдр Томпсона

В работе для формулировки эволюционных уравнений, определяющих изменение плотностей барьеров на СС, построена матрица, устанавливающая возможные взаимодействия расщепленных дислокаций с образованием барьеров [21]. Каждая частичная дислокация, образованная при реакции расщепления, имеет краевую и винтовую составляющие [38].

От ширины расщепления зависит возможность дислокаций образовывать барьеры скольжению: чем больше ширина расщепления, тем более вероятна встреча и реакция с другой расщепленной дислокацией. Для определения средней ширины расщепления рассмотрим задачу на определение равенства двух сил: стягивающей две частичные дислокации в полную, и отталкивающих сил от двух частичных дислокаций. Ширина расщепления определяется из условия равенства сил *отталкивания* двух частичных дислокаций и сил, обусловленных дефектом упаковки [39]:

$$x_d = \frac{Gb^2}{24\pi\gamma_{дв}} \frac{2+\nu}{1-\nu}. \quad (1.3)$$

Рассмотрим образование барьера типа Ломера – Коттрелла с использованием стандартного тетраэдра Томпсона:



При скольжении в расщепленном состоянии дислокации $BA=B\delta+\delta A$, расщепленной в плоскости $\delta(111)$, и $DB=D\alpha+\alpha B$, расщепленной в плоскости $\alpha(1\bar{1}1)$, может произойти образование вершинной дислокации $\alpha\delta$. Упругие поля от дислокаций Шокли, удерживаемых вершинной дислокацией, не позволят подходящим дислокациям преодолеть барьер.

Барьер Хирта также образуется на расщепленных дислокациях в соответствии с реакцией, определяемой соотношением:



где $\delta D / A\alpha$ обозначает вектор на тетраэдре Томпсона, направление которого определяется вектором, соединяющим середины отрезков $\delta D, A\alpha$, длина вектора в два раза больше вектора, соединяющего середины отрезков.

На барьерах может скапливаться большое число дислокаций, повышая общую плотность дислокаций в кристаллите, тем самым приводя к существенному повышению критических напряжений. Скопившиеся на барьере дислокации могут обойти барьер при переползании в другие СС, при рекомбинации барьера или при движении в направлении от барьера.

Рекомбинация барьера происходит при превышении действующих напряжений некоторого критического значения. Движение в направлении от барьера происходит при смене знака действующих напряжений, что характерно для знакопеременных нагрузжений (или при поворотах кристаллитов).

Для описания дислокационных реакций на всех СС в ГЦК-решетке и формулировки эволюционных уравнений для установления изменения плотности барьеров была составлена матрица, определяющая пары СС, на пересечении которых возможно образование барьеров Ломера–Коттрелла и барьеров Хирта (Таблица 1.2). На пересечении строк и столбцов номеров СС единицами обозначены пары, на которых возможно образования барьеров на расщепленных дислокациях, нулями – пары, дислокации которых не могут образовывать барьеры.

Таблица 1.2. Матрица $[R_{\text{bar}}]$, определяющая возможность образования барьеров Ломера–Коттрелла и Хирта на СС. Красные ячейки определяют пары СС, расщепленные дислокации которых способны образовывать барьеры Ломера–Коттрелла, синие – барьеры Хирта

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|----|---|---|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|
| 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 |
| 3 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 |
| 5 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 |
| 7 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 8 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 |
| 10 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 11 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 |
| 12 | 1 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

В таблице указаны все возможные реакции расщепленных дислокаций в ГЦК-кристаллах, движущихся по пересекающимся СС, приводящие к образованию 12 возможных барьеров Ломера–Коттрелла и 12 возможных барьеров Хирта. Разделение барьеров по типам необходимо для описания их возможного разрушения, барьеры Ломера–Коттрелла требуют бóльших касательных напряжений τ для разрушения, чем барьеры Хирта.

При достижении критических напряжений на барьере происходит его рекомбинация на две полные дислокации, обладающие возможностью скольжения. Критические напряжения для барьера могут быть определены из энергетических соображений: при образовании барьера происходит уменьшение суммарной длины векторов Бюргерса реагирующих дислокаций, что приводит к уменьшению упругой энергии вблизи барьера. При поджатии к барьеру нескольких дислокаций может произойти разрушение барьера по

причине энергетически более выгодного процесса – продолжения скольжения дислокаций.

Для оценки упругих полей одиночной дислокации используется известное решение, полученное в предположении упругой изотропной среды, в которой расположена указанная дислокация [38]:

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = -L \cdot \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yy} = -L \cdot \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{xy} = -L \cdot \frac{x(3x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}); \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0. \end{cases} \quad (1.6)$$

Здесь использована декартова ортогональная система координат $Oxyz$, ось Oz направлена по касательной к линии краевой дислокации, Ox – по направлению вектора Бюргерса, Oy – в направлении экстраплоскости. Приняты следующие обозначения: σ_{ij} ($i, j=x, y, z$) – компоненты тензора напряжений Коши, $L=Gb/(2\pi(1-\nu))$, G – модуль Юнга, b – длина вектора Бюргерса, ν – коэффициент Пуассона.

Иммобилизация дислокаций может происходить при движении дислокаций по СС с барьерами, интенсивность этого процесса зависит от плотности барьеров; при разрушении барьеров происходит переход части иммобильных дислокаций в мобильные. Барьер может быть преодолен также путем переползания дислокации на параллельную находящуюся рядом СС.

1.3. Существующие конститутивные модели для описания отклика материалов в условиях сложного деформирования

Для описания пластического деформирования металлов до настоящего времени наиболее широко используются макрофеноменологические модели. Применение таких моделей для описания отклика в условиях сложного нагружения осложняется необходимостью учитывать свойство памяти материалов.

В работе [51] представлена феноменологическая статистическая модель для описания отклика металлических поликристаллов, основанная на схеме самосогласования [95, 53, 20]. Модель использовалась для описания монотонных (одноосного, пропорционального (лучевого) и непропорционального (сложного)) и циклического нагружений. Получены результаты исследования эволюция поверхности текучести после предварительного лучевого (простого) нагружения, эффект Баушингера. С использованием модели были воспроизведены основные наблюдаемые в экспериментах эффекты для ГЦК-материалов.

Макрофеноменологические модели в большинстве случаев основаны на теории пластического течения и различных модификациях законов упрочнения [14, 61, 2] для описания изменения поверхности текучести в ходе пластического деформирования, отличаясь главным образом способом учёта памяти материала в ходе пластического деформирования [106, 85]. Изменение поверхности текучести связывается со сложностью и интенсивностью нагружения, для описания вводятся функционалы с идентифицируемыми с использованием натуральных экспериментов параметрами. В ряде теорий учитывается затухающая память процесса. В большинстве случаев результаты применения данных моделей дают близкие к экспериментальным данным значения, но имеют и недостатки, к которым в первую очередь относятся ограниченность диапазонов параметров воздействия и размерности пространства (напряжений – деформаций) при реализации экспериментов, необходимых для построения рассматриваемых теорий пластичности. К недостаткам относятся также неуниверсальность определяющих соотношений, необходимость их «настраивания» для разных классов материалов и процессов деформирования, потребность в эмпирической идентификации и верификации для конкретных марок сплавов и историй изменения напряженно-деформированного состояния (НДС) без возможности применения данной информации для других материалов. Значительные сложности возникают при необходимости использования

макрофеноменологический ОС для описания процессов сложного нагружения. В этом случае требуется постановка и проведение экспериментов на сложное нагружение, которое реализуется в большинстве случаев в опытах на тонкостенных трубчатых образцах. На этих образцах невозможно провести эксперименты при сколь-нибудь значительных сдвиговых деформациях, при кручении уже при 5–7% деформации образцы теряют устойчивость. Кроме того, размерность опытов в пространстве напряжений – деформаций ограничена значением 3.

Одна из первых попыток теоретически описать процессы циклического деформирования в рамках макрофеноменологического подхода была предпринята еще во второй половине 60-х годов P.J. Armstrong и C.O. Frederick [75]; подход был основан на принципе запаздывания А.А. Ильюшина [13]. В работе была показана невозможность использования критерия Прагера для описания эффекта Баушингера.

Создание конститутивных моделей для описания отклика материалов на циклическое сложное нагружение является нетривиальной задачей, в таких процессах большую роль играет предыстория воздействий [97]. Существует два подхода для решения данной задачи: 1) применение макрофеноменологических теорий пластичности (например, эндохронной теории [128, 129], теории упругопластических процессов А.А.Ильюшина [13] или теории пластического течения с формулировкой закона изменения поверхности текучести в форме функционалов над историей воздействий [49]), 2) использование конститутивных моделей с явным описанием эволюции микроструктуры (с дальнейшим определением механических свойств материала).

Эндохронная модель [128, 129] была применена в [61] для описания экспериментально наблюдаемых эффектов при монотонном или циклическом нагружении поликристаллических образцов. Важной особенностью модели является описание нелинейного кинематического упрочнения, которое является ключевым для моделирования циклического нагружения образцов

из металлических материалов. Анализируются некоторые другие модели: независимая от времени теория пластичности Ohno-Kachi, две вязкопластические модели Walker-Krempf и Yao, эндохронная теория Watanabe и Atluri.

Феноменологическая модель, представленная в [118], позволяет описать зависимость тензора напряжений от деформаций при многоосного пропорциональном и непропорциональном циклических нагружениях. Принимается, что поверхность текучести может испытывать изменения формы и повороты в процессе пластического деформирования; для непропорционального циклического нагружения получена простая зависимость между компонентами тензоров напряжений и деформаций. Результаты удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

Авторы [66] для описания отклика образцов из ГЦК-металлов, подвергаемых пропорциональным и непропорциональным циклическим нагружениям, использовали феноменологическую статистическую самосогласованную модель. Неупругая составляющая деформации определяется вязкопластическими соотношениями для скоростей сдвигов на системах скольжения, для упругой составляющей применен изотропный закон Гука. С помощью модели исследовано нелинейное НДС поликристаллов при сложном циклическом нагружении. Модель позволяет описывать такие эффекты, как эффект Баушингера, памяти о предшествующей деформации, а также ДЦУ. Показано, что предлагаемая модель удовлетворительно описывает упругопластическое деформирование сплава на основе никеля и аустенитной нержавеющей стали 316L.

Детальное описание феноменологической модели, включающей учёт памяти об истории деформирования, и результаты ее применения для описания сложного циклического деформирования представлены в [76]. Были проведены экспериментальные исследования для широкого спектра многоосных нагружений на образцах из алюминиевого сплава, определены параметры модели и проведён ряд численных экспериментов. Авторы

отмечают хорошее как качественное, так и количественное соответствие численных результатов экспериментальным данным.

В работах [3, 4] рассмотрено применение одноповерхностной теории течения при использовании комбинированного закона упрочнения для моделирования упругопластического деформирования металлов при сложном и простом циклическом деформировании. Анализируются результаты расчетных и экспериментальных исследований упругопластического деформирования, на основе их анализа формулируется принцип симметрии циклических свойств. Сравнение результатов применения модели и экспериментов свидетельствует об адекватности разработанной модели.

В последние 20 лет наблюдается резкий рост интереса к построению и применению многоуровневых моделей. Данные модели имеют ряд преимуществ, таких как явное описание процессов изменения микроструктуры и применимости разработанных моделей сразу на широкие классы нагружений и материалов.

В работах [73, 74] рассмотрена физически-ориентированная модель для описания отклика монокристаллов. В работе предлагается разделение упрочнения на активную и латентную части (для активных и неактивных СС соответственно). Для описания латентного упрочнения СС разделяются на три группы в соответствии с возможностью образования барьеров на расщеплённых дислокациях, скользящих соединений и не образующих структур. Также предлагается разделение процесса деформирования на стадии в зависимости от величины накопленных сдвигов. Разработанная модель была применена для описания отклика монокристаллов алюминия и меди. Применение модели для описания пластического деформирования поликристаллических образцов показало хорошее соответствие экспериментальным данным; в частности, показано качественное соответствие разделения СС на классы в зависимости от ориентации относительно приложенных нагрузок. В выводах отмечено, что данный

подход может быть использован для предсказания особенностей пластического поведения монокристаллов, присущих различным материалам.

В работе [130] рассмотрены методы и подходы для описания динамики дислокаций на уровне кристаллической решётки. В работе предложен метод дискретизации пространства рассматриваемой области, задания касательных напряжений и взаимодействия дислокаций упругими полями (напряжений). Рассмотрены механизмы переползания дислокаций в ходе их скольжения, а также описана работа источников дислокаций. При анализе результатов исследователи отметили непрерывное увеличение плотности дислокаций и перераспределение активных систем скольжения в соответствии с активацией фактора Шмида.

Авторами статьи [46] предложены соотношения для определения скоростей сдвига на СС, основанные на теории термической активации. Данное соотношение было включено в упруговязкопластическую модель и применено для описания ГЦК-кристаллитов в двухуровневой модели. Для определения отклика представительного макрообъема (ПО или макро-ПО) принята гипотеза Фойгта. Параметры материала были идентифицированы с использованием существующих экспериментальных данных для образцов из алюминия с помощью процедуры оптимизации квадратичной невязки. Принят закон упрочнения, учитывающий текущие скорости сдвигов и разделяющий активное и латентное упрочнение. Проведено сравнение результатов применения разработанной модели с данными, полученными ранее с использованием других моделей. Авторы отмечают возможность разработанной модели описывать пластическое течение и упрочнение материала до достижения деформаций в 100% для широкого диапазона скоростей деформаций (10^{-3} – 10^{-2} с⁻¹) и диапазона температур от 77 до 298 К.

Работы [77, 78] посвящены описанию активного и латентного упрочнения ГЦК-поликристаллов в условиях сложного нагружения. В работах рассматривались различные траектории нагружения, включающие растяжения и сдвиги. Для описания процессов деформирования рассмотрены

две самосогласованные и прямая упруговязкопластические модели. Для идентификации авторами использованы результаты собственных натуральных экспериментов на сложное нагружение медных поликристаллических образцов. Прямая модель относится к классу одноуровневых, для ее реализации требуется решение краевой задачи с помощью метода конечных элементов; в модели учитываются явным образом плотности дислокаций на системах скольжения, скорости сдвигов, используется анизотропный закон упрочнения (учитывающий взаимодействия всех СС со всеми). К недостаткам модели можно отнести отсутствие прямого учёта образуемых в процессе барьеров на расщеплённых дислокациях (хотя они и учтены опосредованно в законе упрочнения), а также неявный учет эволюции плотностей дефектов. Результаты расчётов с использованием конечно-элементной модели сравнивались с данными натуральных экспериментов, показано их качественное и количественное соответствие.

В работе [137] представлены результаты применения многоуровневой модели для описания отклика представительных макрообъемов гранецентрированных кубических (ГЦК) металлов и сплавов в условиях сложного нагружения. Экспериментальные и теоретические данные свидетельствуют о том, что изменения внутризеренных остаточных микронапряжений в первую очередь зависит от эволюции дислокационной субструктуры в зернах. Несмотря на это, моделирование сложных эффектов циклического нагружения, таких как накопление односторонней неупругой деформации, обычно сводится к применению одной из нескольких известных феноменологических формул для определения тензора остаточных микронапряжений со слабой связью с физическими механизмами. В рассматриваемой работе основанный на микромеханике закон для описания эволюции данного тензора вводится и используется в структуре модели кристаллической пластичности для ГЦК-металлов, которая непосредственно учитывает эволюцию дислокационной субструктуры. Модель используется для описания деформирования образца из нержавеющей стали 316L

(SS316L); показано удовлетворительное соответствие теоретических результатов данным экспериментов, полученным на моно- и поликристаллических образцах, подвергнутых монотонному и циклическому нагружению с полной разгрузкой.

В работе [120] для численного исследования поведения образцов из ГЦК-поликристаллов алюминия использована двухуровневая конститутивная статистическая модель неупругого деформирования с феноменологическим анизотропным законом упрочнения. Проведен статистический анализ движения изображающей точки мезонапряжений по многогранникам текучести кристаллитов, включая сопоставление с данными, получаемыми при использовании изотропного закона упрочнения. Полученные результаты показывают применимость статистических упруговязкопластических моделей для описания процессов сложного нагружения.

Следует отметить важность выбранного закона упрочнения: в моделях для описания неупругого деформирования уравнения для определения эволюции напряжения течения (или критических напряжений сдвига в моделях ФТП) в значительной степени определяют корректное установление отклика и предсказательную мощность модели. Форма закона упрочнения существенно связана с используемыми в модели переменными и структурой модели в целом. В макрофеноменологических моделях обычно закон упрочнения описывается в виде функции от тензора неупругих деформаций, в то время, как в моделях ФТП, непосредственно описывающих сдвиги по СС, в закон упрочнения зачастую входят накопленные сдвиги по системам скольжения, а в моделях, учитывающих плотности дислокаций закон упрочнения сформулирован в виде функции плотностей дефектов (интегрально накопленных, или с разделением по СС).

Работа [117] посвящена описанию и анализу механизмов упрочнения в ОЦК-кристаллах; явным образом учитывается движение, эволюция и взаимодействие дислокаций: образование новых дислокаций путём двойного поперечного скольжения, их аннигиляция, термически активируемое

движение парных перегибов, взаимодействие близких дислокаций. Предложена модель для описания движения дислокаций, основанная на вероятностном подходе, применяемая для рассмотрения преодоленная скоплений дислокаций. Показано хорошее соответствие теоретических результатов данным натуральных экспериментов по величине предела текучести, возможности модели описать стадийность процесса упрочнения (включая лёгкое скольжение и стадию упрочнения), существенно зависящую от температуры.

В модели, представленной в [110, 111], кристаллическое зерно представляется набором ячеек; для описания наборов вводятся ориентации потенциально возможных границ, на которых задаются плотности дислокаций. Предлагаются эволюционные уравнения для определения плотности дислокаций, «налипающих» на границах блоков ячеек. Критические напряжения сдвига устанавливаются по объемной доле границ блоков в зерне и накопленной плотности дислокаций. Входящие в эволюционные уравнения и выражение критического напряжения параметры модели предлагается определять методом наименьших квадратов с использованием данных натуральных экспериментов. В работе приведена постановка задачи оптимизации для поиска параметров модели и алгоритм ее решения. Предлагаемый закон упрочнения был использован в самосогласованной вязкопластической модели для анализа деформирования при сложном нагружении образцов из поликристаллической меди (ГЦК-решетка). Рассматривались несколько программ нагружения: образцы из отожженной меди прокатывались за один проход на 5,6, 10,5 и 18,8 %, затем из них вырезались цилиндрические образцы в направлении прокатки, поперечном направлении и в направлении нормали к плоскости прокатанного листа; в дальнейшем полученные образцы подвергались осадке до деформаций от 24 до 44 %. Для случаев прокатки на 5,6 и 10,5 % и последующей осадки предлагаемая модель показывает хорошее соответствие с экспериментальными данными, в то время как отмечено худшее

соответствие результатов при начальной прокатке в 18,8 %, в связи с чем авторы отмечают необходимость дальнейшей доработки модели, которая позволит описать упрочнение на IV стадии.

Модель, основанная на рассмотрении дислокационных механизмов (включая возможность аннигиляции части накопленных дислокаций при изменении направления деформирования) и пригодная для описания упрочнения СС при сложном нагружении, рассматривается в [90]. Для анализа деформирования поликристаллов предложенная модель упрочнения встроена в самосогласованную вязкопластическую модель. Для идентификации и верификации модели использованы собственные экспериментальные данные, полученные на низкоуглеродистой стали (ОЦК-решетка) в опытах на сложное нагружение (растяжение—сдвиг по разным направлениям, циклический сдвиг).

Основанная на законе упрочнения [90] модель, модифицированная для описания материалов с ГПУ-решеткой, рассматривается в [91]. Особое внимание уделено описанию взаимодействия скольжения дислокаций и двойникования при сложном нагружении. Отмечается, что при резком изменении траектории деформации возможно «раздвойникование», что существенно отражается на упрочнении систем скольжения и двойникования. Для исследования поведения представительного макрообъема поликристалла использована самосогласованная вязкопластическая модель. Модель применялась для описания отклика ГПУ-материалов, модель идентифицирована и верифицирована на основе данных натуральных экспериментов по деформированию образцов из бериллия.

Сопоставлению трех моделей упрочнения посвящена статья [112]. Рассматривались законы упрочнения в изотропной и анизотропной формах. В первом из них параметры упрочнения полагались зависимыми от принадлежности (или непринадлежности) систем скольжения к классу компланарных (или некомпланарных) систем (т. е. параллельных или не параллельных плоскостей скольжения). Для определения напряжения сопротивления сдвигу используются эволюционные уравнения, имеющие

вид обыкновенных дифференциальных уравнений с нелинейной правой частью, представляющей собой сумму произведений параметров упрочнения (различных для компланарных и некомпланарных систем), степенной функции от текущего сопротивления сдвигу и скорости сдвига по соответствующим системам скольжения. Предлагается модификация последнего закона упрочнения, в которой в модули латентного упрочнения вводится дополнительный множитель, равный скалярному произведению единичных векторов направления скольжения взаимодействующих пар систем скольжения, позволяющий описать взаимодействие дислокаций с разных СС. Достаточно детально описана процедура численной реализации модели и полученных результатов решения нескольких тестовых задач.

В работе [58] представлен закон упрочнения для СС, основанный на анализе механизмов эволюции дислокационной субструктуры. В модели рассмотрена эволюция активных дислокаций, описано их взаимодействие с дислокациями леса. Предложено описание процессов «поджимания» и «освобождения» дислокаций от препятствий при реверсивном нагружении. Предлагаемый закон упрочнения включен в самосогласованную вязкопластическую модель, которая применена для анализа поведения образцов из цинкового сплава (ГПУ-решетка) при прямом и реверсивном простом сдвиге; показано удовлетворительное соответствие теоретических и экспериментальных результатов.

Глава 2. Концептуальная и математическая формулировка многоуровневых конститутивных моделей

Разработка моделей, позволяющих учитывать строение металлов на различных масштабных и структурных уровнях ведётся с середины XX века. Теоретическое предположение о существовании, а затем экспериментальное наблюдение дислокаций, как носителей важнейшего механизма пластического деформирования привело к развитию подхода, ориентированного на явное описание физических механизмов неупругого формоизменения. Пионерскими в становлении указанного подхода являются работы Закса [102, 116], Тейлора [123, 124] и др. Активно развивалась и теория дислокаций и более широко – теория дефектов кристаллической структуры. В дальнейшем были открыты и другие моды неупругого деформирования (межзёрное проскальзывание, двойникование), а также дефекты решётки, влияющие на характер пластического деформирования (атомы примеси, вакансии, и др.). При описании внутризёрного скольжения были отмечены такие явления, как образование замкнутых петель новых дислокаций, аннигиляция дислокаций и их взаимодействие. Были исследованы и описаны процессы расщепления дислокаций в материалах с низкой ЭДУ, образование барьеров на расщеплённых дислокациях, процессы огибания и рекомбинации таких барьеров.

Открытие краевых дислокаций позволило определить критерии начала пластического деформирования, основанные на рассмотрении межатомных взаимодействий. Известно, что краевые дислокации расположены и перемещаются (скользят) в плоскостях плотнейшей упаковки решетки с вектором Бюргерса, ориентированным также на направление плотнейшей упаковки (совпадающим с направлением возможного скольжения дислокации); при этом дислокационные взаимодействия и реакции дислокаций обычно описываются одинаковыми законами для материалов с одним типом решётки, что позволяет разрабатывать модели для целых классов материалов. Для скольжения дислокации по СС должен быть

преодолен энергетический барьер, величина которого характеризуется критическим напряжением сдвига $\tau_c^{(k)}$. Величина действующих на краевую дислокацию в k -й СС касательных напряжений $\tau^{(k)}$ устанавливается по действующим на рассматриваемый кристаллит напряжениям (задаваемыми тензором напряжений Коши σ) следующим соотношением:

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \sigma, \quad (2.1)$$

где $\mathbf{b}^{(k)}$ – единичный вектор в направлении вектора Бюргерса, $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичный вектор в направлении вектора нормали, k – номер системы скольжения. Условие движения дислокаций определяется законом Шмида:

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \sigma = \tau_c^{(k)}. \quad (2.2)$$

Закон изменения критических напряжений в ходе пластического деформирования называется законом упрочнения. Одним из первых законов упрочнения был изотропный закон упрочнения, предложенный Тейлором [124], в котором скорость изменения критических напряжений на всех СС одинакова и определяется по суммарному накопленному сдвигу. В дальнейшем закон упрочнения стал учитывать активное (упрочнение в каждой СС за счет взаимодействия движущихся в ней дислокаций друг с другом и с различными барьерами) и латентное (упрочнение в СС, в которых в текущий момент времени отсутствует движение дислокаций, за счет возрастания плотностей дислокаций в пересекающих ее других систем скольжения) упрочнение. В современных законах упрочнения вводится матрица, характеризующая упрочнение на любой СС за счёт изменения дефектной структуры как в рассматриваемой СС, так и в других СС.

В современных моделях все чаще применяется прямое описание эволюции плотностей основных носителей внутризеренного деформирования – дислокаций. Определив плотности дислокаций и зная скорости движения дислокаций на k -й СС, скорости сдвигов по данной системе скольжения устанавливаются уравнением Орована:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \rho^{(k)} V^{(k)} b^{(k)}, \quad (2.3)$$

где $\rho^{(k)}$ – плотность дислокаций, $V^{(k)}$ – средняя скорость скольжения дислокаций, $b^{(k)}$ – величина вектора Бюргера дислокаций в k -й СС.

Вопрос определения структуры моделей (числа рассматриваемых уровней, связей между параметрами разных уровней и т.д.) определяется в соответствии с требуемой степенью детализации рассматриваемых процессов, выбором наиболее значимых механизмов деформирования. Иерархия моделей по структурно-масштабным уровням в большинстве известных работ представляется следующей: макроуровень (уровень поликристаллического агрегата (ПКА)), мезоуровень (уровень кристаллита), микроуровень (кристаллическая решётка и дислокационная структура). В настоящее время наиболее часто применяются двухуровневые модели. Добавление новых уровней обычно обусловлено необходимостью описания тех или иных особенностей поведения металлов, таких как изменение зеренной структуры, зернограничного скольжения, межзёрненного взаимодействия, повреждённости и др.

2.1. Обзор многоуровневых моделей

При построении многоуровневых моделей, основанных на введении внутренних переменных [113, 79, 18, 107, 104, 105] и применении физических теорий пластичности (ФТП) [25, 26, 27], используется понятие структурно-масштабных уровней, которые подразделяются не только в соответствии с характерными размерами элементов различных уровней, но и способами описания физических процессов на каждом из них. При этом элементы одних и тех же характерных размеров (например, субзерна) могут относиться к разным уровням именно по используемым в них различным переменным и способам описания физических процессов (например, в подмодели уровня N описание осуществляется в терминах механических переменных – касательных напряжений, скоростей сдвигов, а на уровне $N+1$ – в терминах плотностей и скоростей движения дислокаций). Для описания поведения

материала на разных уровнях требуется вводить различные эволюционные соотношения.

Классификация многоуровневых моделей может быть произведена по следующим признакам: числу уровней, гипотезе о связи уровней, физическим теориям, положенным в основу подмодели нижнего уровня.

Современные многоуровневые модели обычно включают два масштабных уровня (макроуровень и мезоуровень), однако существует ряд процессов, описание которых требует включения дополнительных уровней. В качестве примеров трёхуровневых моделей можно привести модели, описывающие межзёренное скольжение [119], или более детально описывающие процессы эволюции плотностей дефектов [108].

Важным отличительным признаком при классификации многоуровневых моделей, является принимаемая гипотеза о связи характеристик различных уровней. По данному признаку можно выделить три основные группы моделей: статистические, самосогласованные и прямые [31,32].

Статистические модели [124, 55, 56] основаны на рассмотрении элементов нижних масштабных уровней относительно независимо друг от друга, агрегирование элементов в представительный объём осуществляется по части характеристик на основе принимаемых гипотез кинематического или статического типа, по остальным характеристикам осуществляется осреднение. Большая часть существующих статистических моделей основана на гипотезе Фойгта. Напряжения на уровне (ПО) в этом случае определяются осреднением напряжений по объёму наборе входящих в ПО кристаллитов.

Менее распространенными являются статистические модели типа Закса, основанные на гипотезе Рейса [116], в которых в каждый момент деформирования напряжения считаются однородными для элементов, входящих в ПО. В данных моделях компоненты тензора деформации скорости макроуровня определяются осреднением по поликристаллическому агрегату. По интенсивности напряжений макроуровня модели, использующие

гипотезу Фойгта, дают более высокие значения, чем результаты, полученные по гипотезе Рейса.

Следует отметить, что применение той или иной гипотезы о связи уровней может привести к качественно различающимся результатам; так, в работе [98] указывается, что применение гипотезы Фойгта при исследовании процесса прокатки дает текстуру меди, а гипотезы Рейса — текстуру латуни. Ни одна из предлагаемых гипотез не отражает реальные взаимодействия зерен в поликристалле, т.к. в таких моделях обычно не учитывается взаиморасположение элементов (зерен, субзерен) в поликристалле, вследствие чего они не дают возможности учитывать взаимодействие и взаимовлияние механизмов деформирования и их носителей в соседних кристаллитах. Модели, основанные на одной из вышеуказанных гипотез, относятся к классу статистических моделей, поскольку отклик материала на макроуровне определяется статистическим осреднением соответствующих характеристик мезоуровня. Существуют также статистические модели, которые можно отнести к комбинированным, в которых осреднение осуществляется с применением обеих гипотез.

Иной подход к гомогенизации параметров и соотношений макроуровня по соответствующим данным микроуровня предложен в [40]. В данном подходе конститутивные соотношения макроуровня представляются разложением в ряд на основе определяющих соотношений микроуровня и моментов произвольного порядка переменных микроуровня.

Более физически обоснованными являются самосогласованные модели, в которых рассматривается поведение отдельного включения – кристаллита канонической формы, заключенного в матрицу с эффективными характеристиками поликристалла, определяемыми итерационным путем по свойствам элементов мезоуровня с применением процедуры осреднения [132, 81, 54]. Применение моделей данного класса связано с существенными затратами вычислительных ресурсов, в связи с чем они обычно используются в теоретических работах, при описании поведения макро-ПО.

Развитием самосогласованных моделей являются «прямые» модели, в которых каждое зерно представляется совокупностью одного или нескольких конечных элементов [133, 115, 45], для каждого из которых используется модель ФТП. При таком подходе нет явного разделения на масштабные уровни – с помощью метода конечных элементов проводится моделирование расчетной области с большой дискретизацией. В таком случае вопроса о «согласовании» полей перемещений и напряжений не возникает, т.к. непрерывность полей обеспечивается постановкой задачи и методом ее решения. Следует отметить, что прямые модели требуют ещё больших вычислительных ресурсов, чем самосогласованные.

Для моделирования реальных технологических процессов в настоящее время наиболее востребованными являются статистические конститутивные модели, являющиеся наиболее эффективными с точки зрения вычислительных затрат и обеспечивающие приемлемую точность описания процессов термомеханической обработки. По этой причине далее преимущественно рассматриваются статистические модели для исследования поведения поликристаллических металлов. Однако стоит заметить, что предлагаемые соотношения мезоуровня без изменений могут применяться в рамках прямых моделей (для этого в постановке для статистической модели в качестве выборки необходимо рассмотреть один кристаллит и использовать данную модель для каждой точки интегрирования на мезоуровне при применении метода конечных элементов). В предлагаемой работе за основу выбрана статистическая двухуровневая модель, модифицированная введением дополнительного структурного уровня (мезоуровня-2) для описания эволюции плотностей дефектов и необходимыми изменениями соотношений мезоуровня-1.

Описание изменения переменных на каждом из уровней требует уравнений, которые могут существенно отличаться от соотношений на других уровнях. Например, в моделях, рассматривающих атомарные взаимодействия, вводятся дискретные объекты (атомы и молекулы), для

описания их взаимодействий используются методы атомарной динамики и статики; на следующем вышележащем уровне (микроуровне) анализируемыми объектами являются отдельные дислокации или их плотности на СС; еще на более высоком уровне (мезоуровне) деформирование описывается в терминах сдвигов по СС. Наконец, на верхнем иерархическом уровне (макроуровне) модели оперируют сугубо механическими характеристиками (деформациями, напряжениями и скоростями их изменения).

Многоуровневые модели позволяют создать альтернативу макрофеноменологическим ОС по способу учета предыстории воздействий. Классические модели для исследования поведения деформируемых твердых тел вводят свойство памяти посредством использования сложных нелинейных операторов над тензорзначными полями, описывающими историю воздействий. В последние десятилетия все более широко применяются конститутивные модели с введением внутренних переменных (ВП) [43, 44, 63, 64, 103, 107, 105], под которым в настоящей работе понимаются параметры, характеризующие эволюционирующую мезо- и микроструктуру исследуемых материалов (включая параметры, отражающие симметричные свойства материала). Явное введение в структуру конститутивных моделей (КМ) внутренних переменных и формулировка эволюционных (кинетических) уравнений для них позволяют существенно упростить систему уравнений КМ, избавиться от операторных уравнений над историей воздействий. При этом свойство памяти не устраняется из рассмотрения, «носителями» памяти являются ВП. Внутренние переменные способны описать «внутреннее состояние» термодинамических систем с большим числом сценариев развития, неустойчивостями, возникновением и разрушением внутренних структур.

Одними из первых работ, в которых в механике деформируемого твердого тела (МДТТ) было введено понятие внутренних переменных, являются статьи [113, 89], в них предложена структура модели так

называемых «стандартных обобщенных материалов», основанной на понятии внутренних переменных и термодинамике необратимых процессов. Сходные понятия структурных параметров использовал Ю. Н. Работнов [23] для описания ползучести. Структурными параметрами состояния Ю. Н. Работнов называл некоторые количественные характеристики микро- и субмикроструктуры (например, плотность дислокаций). Вопросы построения ОС с использованием «внутренних параметров состояния системы» затрагивались также в работе [15]. В понятие «внутренние параметры состояния» авторы вкладывают смысл макроскопических характеристик изменяющейся структуры материала (например, статистически осредненная плотность дефектов). В дальнейшем внутренние параметры состояния использовались авторами цитируемой работы для формального вывода ОС на основе термодинамического подхода.

Рассмотрим общую структуру конститутивных моделей, основанных на введении внутренних переменных. В качестве внутренних переменных используются тензорзначные переменные $\mathbf{J}_\beta, \beta=\overline{1, V}$ (произвольной валентности). Следует отметить, что часть внутренних переменных непосредственно входит в структуру ОС данного масштабного уровня, такие переменные, называемые внутренними «явными» переменными, в дальнейшем обозначаются как $\mathbf{J}_\beta^e, \beta=\overline{1, V^e}$. К числу таких переменных относятся, например, параметры, характеризующие форму, положение и размеры поверхности текучести в теориях пластического течения, или критические напряжения на СС в подмодели мезоуровня в многоуровневых моделях.

Вторая группа внутренних переменных (в большинстве случаев относящихся к более глубоким масштабным уровням) $\mathbf{J}_\beta^i, \beta=\overline{1, V^i}$, называемыми неявными ВП, входит в качестве переменных в эволюционные уравнения. К числу таких переменных в теориях неупругого деформирования поликристаллов (мезо- и макроуровней) можно отнести, например, плотности

дефектов кристаллической решётки. Полная совокупность внутренних переменных, таким образом, определяется следующим множеством:

$$\{\mathbf{J}_\alpha\} = \{\mathbf{J}_\beta^e, \mathbf{J}_\gamma^i\}, \alpha = \overline{1, B}, \beta = \overline{1, B^e}, \gamma = \overline{1, B^i}, \mathbf{V} = \mathbf{V}^e + \mathbf{V}^i. \quad (2.4)$$

Наиболее употребительными в механике сплошных сред (МСС) являются уравнения состояния, записанные в разрешенном относительно напряжений виде:

$$\Sigma = \mathbf{F}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta^e), \quad (2.5)$$

где P_α – воздействия. Определяющие соотношения должны быть дополнены еще двумя группами соотношений – эволюционными и замыкающими. К эволюционным уравнениям относятся соотношения для определения внутренних скрытых переменных J_β^i , записанные в общем виде:

$$\mathbf{J}_\gamma^i = \mathbf{R}_\gamma(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta^i). \quad (2.6)$$

Для решения проблемы замыкания, может быть использовано два подхода. Первый – феноменологический, где параметры, характеризующие структуру на более низких масштабных уровнях, определяются функциональными уравнениями через параметры рассматриваемого уровня с последующей экспериментальной проверкой этих уравнений. Второй подход основан на построении иерархической совокупности моделей нескольких масштабных уровней и установлении связей между однотипными характеристиками процесса деформирования соседних уровней. Следует отметить, что в этом случае полностью избежать феноменологических соотношений, не удастся, однако они записываются для более низкого масштабного уровня в принятой иерархической совокупности.

В любом случае для замкнутой модели материала требуются уравнения, связывающие внутренние явные переменные, непосредственно входящие в ОС рассматриваемого масштабного уровня, с параметрами воздействия и внутренними скрытыми (неявными) переменными. Общий вид таких замыкающих уравнений представлен ниже:

$$\mathbf{J}_\beta^e = \mathbf{C}_\beta(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta^i). \quad (2.7)$$

Таким образом, внутренние переменные подразделяются на явные и неявные; явные непосредственно входят в структуру ОС данного масштабного уровня; к неявным относятся переменные, описывающие микроструктуру более глубоких структурно-масштабных уровней и входящие в качестве переменных в эволюционные уравнения на данном масштабном уровне. Необходимо отметить, что одни и те же внутренние переменные на разных структурных уровнях могут быть выступать как в роли явных, так и в роли неявных.

К достоинствам подхода с введением ВП относятся ясность физической интерпретации эволюционных и определяющих соотношений, возможность прямой или косвенной проверки результатов анализа эволюции мезо- и микроструктуры, относительно простая форма определяющих и эволюционных уравнений модели, широкие возможности обработки результатов решения эволюционных уравнений при переходе к макропеременным (с использованием различных операторов осреднения). Кроме того, поскольку эволюционные уравнения описывают фундаментальные физические механизмы и реально существующие в природе объекты, применимые для широких классов материалов и процессов воздействия на них, модели данного типа обладают значительной универсальностью. К трудностям подхода можно отнести большое число ВП и соответствующих эволюционных уравнений, необходимых для адекватного описания процессов необратимого деформирования, а также сложность решения задачи замыкания системы уравнений и отсутствие в подавляющем большинстве случаев аналитических решений системы уравнений модели, что приводит к необходимости использования численных методов.

Необходимо обратить внимание на факт, что все теории, используемые для описания поведения деформируемых твердых тел, подвергаемых необратимым деформациям, явно или неявно используют данный подход.

Так, к внутренним переменным можно отнести такие понятия как поверхность текучести, поврежденность и др.

Кратко отметим основные положения и структуру взятой в настоящей работе за основу двухуровневой конститутивной упруговязкопластической модели [33, 28, 29]. В указанной модели реакция материала на каждом структурно-масштабном уровне определяется по отклику набора элементов нижнего масштабного уровня, достаточного для описания процесса в статистическом смысле (что позволяет говорить о представительности набора элементов соответствующего уровня). Одновременно с этим, элементы каждого уровня являются представительными объемами (ПО) материала на данном структурно-масштабном уровне, с требуемой точностью описывающим осредненные свойства материала на этом уровне; в пределах ПО каждого уровня напряженно-деформированное состояние полагается однородным. В рассматриваемой двухуровневой модели для описания отклика поликристаллического материала элементом верхнего масштабного уровня является представительный макрообъем (аналог макрообразца), а каждый рассматриваемый кристаллит является представительным объемом мезоуровня. При построении использованной модели были приняты следующие гипотезы:

- представительный объем материала на макроуровне содержит статистически достаточный набор кристаллитов, т.е. элементов мезоуровня, с заданными по известному закону распределения ориентациями;
- элементом мезоуровня описывается отдельный кристаллит, в начальный момент времени находящийся в естественной конфигурации с известной ориентацией и заданной плотностью дислокаций, позволяющих произвести сдвиговую деформацию по системам скольжения при достижении касательными напряжениями предписанной величины;
- используется гипотеза Фойгта – градиент скорости перемещений частиц кристаллитов определяется градиентом скорости перемещений с макроуровня;

- нагрузка задаётся в жёсткой форме (кинематически) и полагается квазистатическим (введено ограничение на темп изменения скорости деформации);
- отклик каждого кристаллита может быть определён с использованием конститутивной модели мезоуровня, позволяющей описать неупругое деформирование и однородное напряженно-деформированное состояние для каждого кристаллита;
- реакция ПО макроуровня вычисляется осреднением откликов элементов мезоуровня с учетом условий согласования определяющих соотношений обеих уровней;
- квазитвердое движение на макроуровне описывается в соответствии с принимаемой гипотезой о разложении движения.

2.2. Математическая формулировка базовой 2-уровневой модели: соотношения, классификация переменных и параметров модели

В настоящей работе используется отмеченный выше подход к построению моделей, основанный на введении внутренних переменных. Для передачи воздействия, задаваемого на макроуровне, на мезоуровень в модели применяется обобщенная гипотеза Фойгта, согласно которой градиент скорости перемещений для каждого кристаллита совпадает с градиентом скорости перемещений макроуровня $\hat{\nabla} \mathbf{v} = \hat{\nabla} \mathbf{V}$ (здесь и далее для сокращения записи номера кристаллитов опущены).

На макроуровне в качестве меры полных скоростей деформаций принят градиент относительных скоростей перемещений:

$$\mathbf{Z} = \nabla \mathbf{V}^T - \mathbf{\Omega}, \quad (2.8)$$

где $\hat{\nabla} \mathbf{V}^T$ – транспонированный градиент скорости перемещений, определенный в актуальной конфигурации, $\mathbf{\Omega}$ – спин жесткой подвижной системы координат (ПСК) макроуровня, определяемый осреднением спинов аналогичных жестких систем кристаллитов. Движение ПСК трактуется как

квазитвердое движение ПО, движение частиц материала относительно ПСК характеризует деформационную составляющую движения. Используемая мера является несимметричной и независимой от выбора системы отсчета (индифферентной). В рассматриваемой двухуровневой модели [28] величины $\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{\Pi}$, \mathbf{Z}^{in} , $\mathbf{\Sigma}$ являются явными внутренними переменными макроуровня, для определения которых формулируются соответствующие замыкающие уравнения.

Конститутивная модель макроуровня представляется следующей совокупностью соотношений (здесь и далее параметры макроуровня обозначаются заглавными буквами, соответствующие параметры мезоуровня – аналогичными строчными):

$$\begin{cases} \mathbf{\Sigma}^r \equiv \dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Omega}^T \cdot \mathbf{\Sigma} + \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Omega} = \mathbf{\Pi} : (\mathbf{Z} - \mathbf{Z}^{\text{in}}), \\ \mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}(\mathbf{p}_{(i)}, \mathbf{o}_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}(\mathbf{\omega}_{(i)}, \mathbf{p}_{(i)}, \mathbf{\sigma}_{(i)}), i = 1, \dots, N, \\ \mathbf{Z}^{\text{in}} = \mathbf{Z}^{\text{in}}(\mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{p}_{(i)}, \mathbf{\omega}_{(i)}), i = 1, \dots, N, \end{cases} \quad (2.9)$$

где $\mathbf{\Sigma}$ – тензор напряжений Коши макроуровня, $\mathbf{\Pi}$ – тензор модулей упругости, $\mathbf{Z}, \mathbf{Z}^{\text{in}}$ – меры скорости, её упругая и неупругая составляющая, индекс «г» означает независимую от выбора системы отсчета (коротационную) производную; $\mathbf{p}_{(i)}, \mathbf{\sigma}_{(i)}, \mathbf{d}_{(i)}^{\text{in}}, \mathbf{\omega}_{(i)}, \mathbf{o}_{(i)}$ – тензоры модулей упругости, напряжений, неупругой составляющей деформации скорости, спина и ориентации i -го кристаллита, N – число кристаллитов, образующих представительный макрообъем. При этом величины макроуровня зависят от всей совокупности соответствующих параметров мезоуровня. В рамках используемого конститутивного подхода величины $\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{\Pi}$, \mathbf{Z}_{in} , $\mathbf{\Sigma}$ являются внутренними явными переменными макроуровня. В конститутивной модели мезоуровня соотношения (2.9₁) – определяющее соотношение, уравнения для определения эволюционирующих величин $\mathbf{\omega}_{(i)}, \mathbf{p}_{(i)}, \mathbf{\sigma}_{(i)}, \mathbf{z}_{(i)}^{\text{in}}$ формулируются в подмодели мезоуровня и с позиций подмодели макроуровня относятся к

эволюционным уравнениям, в качестве замыкающих выступают уравнения (2.9₂), (2.9₃), (2.9₄), устанавливающие операции осреднения параметров мезоуровня [33].

В статье [28] рассмотрена задача согласования определяющих соотношений различных масштабных уровней в двухуровневых моделях для описания неупругого деформирования, одним из результатов решения которой явилось определение спина квазитвердого движения на макроуровне $\mathbf{\Omega}$ и неупругой составляющей меры скорости деформации на макроуровне \mathbf{Z}^{in} , обеспечивающих выполнение условий согласования:

$$\mathbf{P} = \langle \mathbf{p} \rangle, \quad \mathbf{\Sigma} = \langle \mathbf{\sigma} \rangle, \quad \mathbf{Z} = \langle \mathbf{z} \rangle, \quad (2.10)$$

где $\langle \cdot \rangle$ – оператор осреднения по совокупности элементов мезоуровня, входящих в рассматриваемый ПО макроуровня.

Показано, что для выполнения условий (2.9₁) в совокупности с системами уравнений (2.9₁₂)–(2.9₁₄), тензоры спина $\mathbf{\Omega}$ и неупругой составляющей тензора деформации скорости следует определить согласно соотношениям:

$$\mathbf{\Omega} = \langle \mathbf{\omega} \rangle, \quad (2.11)$$

$$\mathbf{Z}^{in} = \langle \mathbf{z}^{in} \rangle + \mathbf{P}^{-1} : \langle \mathbf{p}' : \mathbf{z}^{in'} \rangle - \mathbf{P}^{-1} : (\langle \mathbf{\omega}' \cdot \mathbf{\sigma}' \rangle - \langle \mathbf{\sigma}' \cdot \mathbf{\omega}' \rangle) \quad (2.12)$$

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

В качестве определяющего соотношения для элемента мезоуровня используется закон Гука в скоростной релаксационной форме. Система разрешающих уравнений для кристаллита в скоростях имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\pi} : (\mathbf{z} - \mathbf{z}^{in}), \\ \mathbf{z} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{in}, \\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^T, \\ \boldsymbol{\tau}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}, \\ \mathbf{z}^{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \\ \dot{\gamma}^{(i)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\boldsymbol{\tau}^{(i)}}{\boldsymbol{\tau}_c^{(i)}} \right|^{1/n} H(\boldsymbol{\tau}^{(i)} - \boldsymbol{\tau}_c^{(i)}), \quad i = 1, \dots, K, \\ \dot{\boldsymbol{\tau}}_c^{(i)} = f(\gamma^{(j)}, \dot{\gamma}^{(j)}), \quad i, j = 1, \dots, K, \end{array} \right. \quad (2.13)$$

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

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

подвижной системы координат кристаллита, связанной с кристаллической решеткой. Различные модели поворота решетки подробно рассмотрены в работе [34].

Для описания разворотов кристаллитов в рамках ФТП часто используется модель стеснённого поворота Дж.И.Тейлора, где спин ω квазитвердого движения принимался равным антисимметричной части тензора скоростей неупругих сдвигов по системам скольжения кристаллита:

$$\omega = \frac{1}{2}(\hat{V}\mathbf{v} - \hat{V}\mathbf{v}^T) - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} (\mathbf{b}^k \mathbf{n}^k - \mathbf{n}^k \mathbf{b}^k), \quad (2.14)$$

где K – количество активных систем скольжения, при этом предполагается, что мгновенная угловая скорость вращения кристаллической решетки элемента мезоуровня соответствует упругому спину. Данная модель описывает поворот кристаллита, окруженного жесткими непроницаемыми границами.

В существующей модели использовался анизотропный закон упрочнения, учитывающий вклад в изменение критических напряжений в каждой СС скоростей сдвигов всех систем скольжения:

$$\dot{\tau}_c^{(i)} = \sum_{k=1}^K H_{ik} \dot{\gamma}^{(k)}, \quad (2.15)$$

где H_{ik} – компоненты матрицы упрочнения, связывающей изменения критических напряжений на произвольной i -й СС со скоростями сдвигов по всем системам, включая активные, позволяющей неявным образом учесть взаимодействие краевых дислокаций различных СС.

Глава 3. Структура трехуровневой дислокационно-ориентированной модели

Использование подхода с введением внутренних переменных для анализа процессов неупругого деформирования металлов и сплавов с учетом изменения мезо- и микроструктуры предоставляет возможность практически

неограниченно расширять и углублять модель включением в рассмотрение явным образом механизмов и их носителей более глубоких масштабных уровней, описание влияния которых в исходной двухуровневой модели осуществляется неявным образом введением некоторых осредненных параметров. Так, в исходной модели отсутствует явное описание изменения плотностей дислокаций на системах скольжения (СС) в ходе пластического деформирования, которые, как это известно из натуральных экспериментов, могут изменяться на несколько порядков. В двухуровневой модели влияние изменения плотностей дислокаций описывается опосредовано, через изменения критических напряжений сдвига, определяемые по величинам сдвигов по СС. При оперировании только скоростями сдвигов возникают сложности при построении адекватных законов упрочнения (являющихся ключевыми элементами при построении физических теорий пластичности), которые должны отражать взаимодействия различных типов дислокаций, формирование барьеров дислокационной природы, скопления дислокаций и другие «тонкие» эффекты, обусловленные эволюционирующей дислокационной субструктурой. Рассмотрение формирования различных дислокационных субструктур необходимо также для анализа процессов сложного нагружения, возникновения микро- и мезотрещин, возврата и рекристаллизации.

Упомянутые выше обстоятельства стимулировали исследования в области построения многоуровневых моделей, включающих в свою структуру подмодели с явным описанием эволюции дислокационных субструктур, интенсивно развиваемые в последние 10-15 лет [47, 114, 83, 84, 134, 89, 92]. К преимуществам данных моделей можно отнести их большую универсальность, поскольку основные механизмы деформирования и эволюции мезо- и микроструктуры (включая дислокационные субструктуры) практически одинаковы для широких классов материалов и диапазонов воздействий. В то же время следует отметить, что модели данного класса требуют определения большого числа параметров, входящих в соотношения

для описания процессов эволюции структуры на различных структурно-масштабных уровнях. Данная задача может быть решена с использованием подмоделей более глубоких масштабных уровней, например, с использованием методов дислокационной или молекулярной динамики [70, 101, 65].

Анализ существующих подходов к описанию сложного монотонного и циклического деформирования показал целесообразность построения модели, опирающейся на прямое описание дефектов кристаллической решётки и их эволюции, включая формулировку физически обоснованных законов упрочнения. При разработке необходимо учесть влияние величины ЭДУ на процесс эволюции микроструктуры, в первую очередь – на образование барьеров на расщеплённых дислокациях и их влияние на упрочнение.

3.1 Концептуальная постановка подмодели мезоуровня-2

Представленная в главе 2 двухуровневая модель модифицирована добавлением третьего уровня, на котором описывается эволюция плотностей дефектов кристаллической решётки. Предложенная модель относится к классу статистических, включает подмодели для описания поведения поликристаллов на трех структурно-масштабных уровнях: макроуровне, на котором описывается отклик ПО макроуровня, мезоуровне-1, предназначенным для рассмотрения поведения кристаллитов (субзерен, фрагментов) в терминах механических переменных (напряжений, деформаций и т.п.), и мезоуровне-2, на котором исследуется эволюция плотностей дефектов – дислокаций, дислокационных петель и барьеров, образующихся при взаимодействии расщеплённых дислокаций. Как отмечено выше, модель основана на подходе с введением на каждом уровне явных и неявных внутренних переменных – тензорзначных (произвольного ранга) переменных, описывающих эволюционирующую мезо- и микроструктуру нижележащих уровней. Введение этих дополнительных

переменных позволяет избежать необходимости использования в структуре конститутивных моделей сложных операторных (функциональных) соотношений, сохраняя при этом возможность учета памяти материала, носителями которой и являются ВП. Большинство соотношений конститутивной модели в этом случае представляют собой тензорно-алгебраические или обыкновенные дифференциальные уравнения. Принимается, что ВП однородны в пределах рассматриваемых элементов соответствующего уровня. Явные ВП входят напрямую в определяющие соотношения рассматриваемого уровня, они связаны кинетическими уравнениями с неявными переменными, описывающими структуру материала на более глубоких структурно-масштабных уровнях [33].

В качестве дополнительных ВП на мезоуровне-2 введены плотности дислокаций по системам скольжения с разделением на положительные и отрицательные $\rho_+^{(k)}, \rho_-^{(k)}$ [м^{-2}] (по ориентации вектора нормали к системе скольжения, направленного в сторону экстраплоскости), плотности источников образования новых дислокаций по механизму Франка-Рида $\rho_{src}^{(k)}$ [м^{-3}], а также плотности барьеров, образующихся при взаимодействии расщеплённых дислокаций k -й и l -й систем скольжения $\rho_{bar}^{(kl)}$ [м^{-2}]. Ключевым механизмом неупругого деформирования полагается движение краевых дислокаций по системам скольжения (СС). На мезоуровне-2 введены соотношения для определения скоростей движения дислокаций в зависимости от текущих касательных напряжений, температуры и критических напряжений сдвига, в свою очередь зависящих от плотностей накопленных дефектов на СС. Мезоуровень-1 и мезоуровень-2 связаны прямой и обратными связями: с мезо-1 на мезо-2 передаются касательные напряжения в качестве силового фактора изменения дефектной структуры, с мезо-2 на мезо-1 передаются скорости сдвигов по СС для определения кинематического отклика. Таким образом, на мезо-1 описывается поведение ПО кристаллита как механической системы, на мезо-2 с использованием

подхода с введением внутренних переменных описывается эволюция дефектной микроструктуры (рис. 3.1).

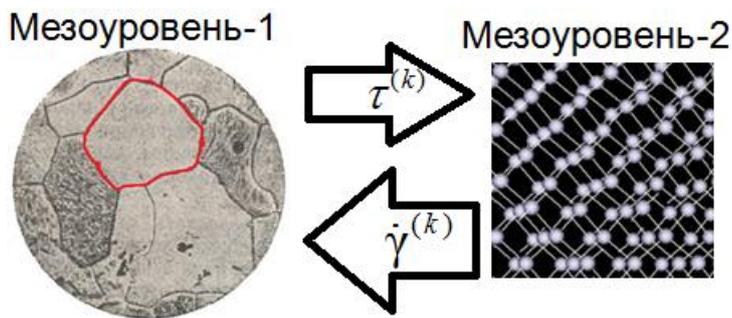


Рисунок 3.1 Схематическое изображение связей мезоуровня-1 и мезоуровня-2

В рассматриваемой модификации предложено введение такого объекта, как зерно – статистически значимое множество (десятки и сотни) кристаллитов – представителей мезоуровня-1 (субзёрен, фрагментов, для которых с принятой точностью можно считать одинаковой ориентацию решётки, а внутренние переменные — однородными). Субзёрна в отсчётной конфигурации имеют отличную (до двух градусов) разориентацию относительно ориентации зерна (Рис.3.2).

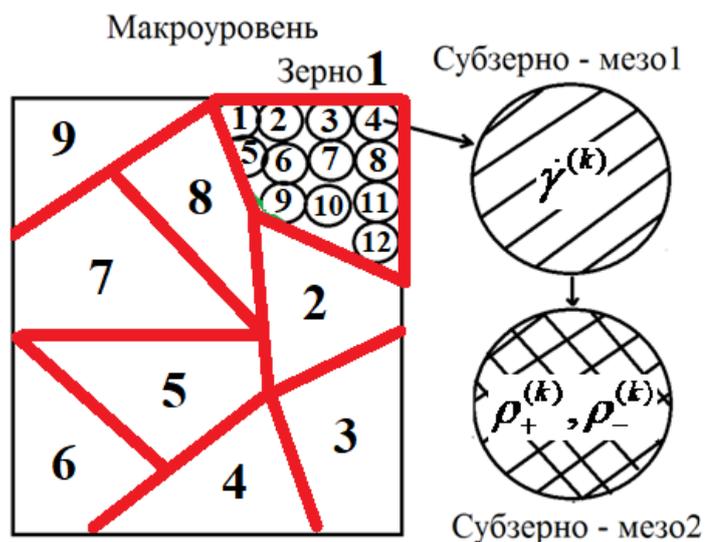


Рисунок 3.2 Концептуальная структура ПО материала, включающее зёрна и субзёрна – слаборазориентированные относительно ориентации зерна элементы мезоуровня-2

Внутренними переменными подмодели мезоуровня-2 являются: плотности дислокаций (положительных и отрицательных), плотности источников дислокаций на СС, плотности образующихся при взаимодействии дислокаций барьеров скольжению [52, 121]. Наибольшее внимание при построении предлагаемой модели уделяется физически обоснованному описанию дислокационного скольжения, взаимодействия дислокаций друг с другом, в том числе – расщеплённых дислокаций с образованием барьеров Ломера–Коттрелла и Хирта. Явными ВП на мезоуровне-1 являются неупругая составляющая меры скорости деформации, тензор упругих модулей (4-го ранга), тензор спина, неявными ВП – ориентационный тензор решетки, скорость сдвигов на СС, касательные напряжения на СС.

3.2 Уравнения для описания эволюции внутренних переменных мезоуровня-2

На мезоуровне-1 с использованием пластической составляющей меры скорости деформации \mathbf{z}^{in} , определяемой по скоростям движения и плотностям дислокаций, найденным в подмодели мезоуровня-2, вычисляются компоненты тензора напряжений Коши $\boldsymbol{\sigma}$. Осреднение тензора $\boldsymbol{\sigma}$ по совокупности кристаллитов, составляющих представительный объём макроуровня, позволяет установить тензор макронапряжений Коши $\boldsymbol{\Sigma}$. По напряжениям $\boldsymbol{\sigma}$, единичным векторам нормали и направления скольжения находятся действующие на каждой k -й СС касательные напряжения $\tau^{(k)}$ мезоуровня-1. Скорости сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}$ вычисляются по скоростям движения и текущим плотностям дислокаций, установленным на мезоуровне-2. Изменения параметров, описывающих состояние элементов мезоуровня-1 (включая ВП), определяются из решения следующей системы уравнений (номера элементов — кристаллитов опущены) [34]:

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{z}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{n} : (\mathbf{z} - \mathbf{z}^{in}), \\ \mathbf{z} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{in}, \\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{z}^T, \\ \mathbf{z}^{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \\ \boldsymbol{\tau}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}. \end{cases} \quad (3.1)$$

Описание эволюции дислокационной субструктуры производится с использованием подмодели мезоуровня-2. В качестве воздействий с мезоуровня-1 на мезоуровень-2 передаются действующие по СС касательные напряжения $\tau^{(k)}$ и температура. Эволюция плотностей дефектов на СС описывается с учётом наиболее значимых механизмов: зарождения дислокаций за счёт работы источников Франка–Рида, аннигиляции дислокаций разных знаков на одинаковых СС, изменения плотности барьеров на СС [89, 100]. На мезоуровне-2 определяются также средние скорости положительных и отрицательных дислокаций $V_{\pm}^{(k)}$, зависящие от величины касательных напряжений $\tau^{(k)}$, температуры θ , плотности положительных и отрицательных дислокаций $\rho_{+}^{(k)}, \rho_{-}^{(k)}$ и плотности барьеров $\rho_{bar}^{(k)}$ на СС. Используется аддитивное разложение скорости изменения критических напряжений сдвига $\dot{\tau}_c^{(k)}$ на составляющие, определяющие зависимости от изменения плотностей дислокаций по СС $\dot{\tau}_{c_dis}^{(k)}$ и плотностей барьеров $\dot{\tau}_{c_bar}^{(k)}$. В отсчётной конфигурации, принимаемой естественной [24], критические напряжения определяются сопротивлением решётки $\tau_{c_lat}^{(k)}$; более детально закон упрочнения описан в следующем параграфе. Скорости сдвигов находятся из уравнения Орована [109], записанного в скоростной форме. Система уравнений, описывающая поведение кристаллита на мезоуровне-2, имеет следующий общий вид [127, 30, 131]:

$$\begin{cases} V_{\pm}^{(k)} = \pm f_1(\tau^{(k)}, \tau_{c\pm}^{(k)}, \theta, \rho_{\pm}^{(l)}, \rho_{bar}^{(kl)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\ \dot{\rho}_{\pm}^{(k)} = f_2(\tau^{(k)}, \tau_{c\pm}^{(k)}, \theta, \rho_{\pm}^{(k)}, \rho_{bar}^{(kl)}), \\ \dot{\gamma}^{(k)} = (\rho_+^{(k)} V_+^{(k)} - \rho_-^{(k)} V_-^{(k)}) |\mathbf{b}|^{(k)}, \\ \dot{\rho}_{bar}^{(kl)} = f_3(\tau^{(k)}, \tau_{c\pm}^{(k)}, \theta, \rho_{\pm}^{(k)}, \rho_{bar}^{(kl)}), \\ \tau_{c0\pm}^{(k)} = \tau_{c_lat}^{(k)}, \\ \dot{\tau}_{c\pm}^{(k)} = \dot{\tau}_{c_dis\pm}^{(k)} + \dot{\tau}_{c_bar\pm}^{(k)}, \quad k, l = \overline{1, K}, \end{cases} \quad (3.2)$$

где $|\mathbf{b}^{(k)}|$ – модуль вектора Бюргерса в k -й СС, K – число СС.

При описании неупругого деформирования и дислокационных реакций важнейшую роль играют средние скорости движения дислокаций противоположных знаков $V_+^{(k)}, V_-^{(k)}$, которые на одной и той же кристаллографической плоскости отличаются друг от друга не только знаком, но величиной. При этом необходимо учитывать, что движения дислокаций обоих знаков по одной СС вносят вклад в скорость сдвига по данной системе, в связи с чем уравнение Орована в скоростях [109] используется в несколько модифицированной версии:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = (\rho_+^{(k)} V_+^{(k)} - \rho_-^{(k)} V_-^{(k)}) |\mathbf{b}^{(k)}|. \quad (3.3)$$

Средние скорости движения дислокаций определяются из следующих соотношений [94, 127]:

$$\begin{cases} V_+^{(k)} = l^{(k)} v \exp(-\Delta G_{*+}^k / k_B \theta) \text{H}(|\tau^{(k)}| - \tau_{c+}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\ V_-^{(k)} = -l^{(k)} v \exp(-\Delta G_{*-}^k / k_B \theta) \text{H}(|\tau^{(k)}| - \tau_{c-}^{(k)}) \text{sign}(\tau^{(k)}), \end{cases} \quad (3.4)$$

$$\Delta G_{*\pm}^{(k)} = \frac{\Delta F_*^{(k)}}{1 + g \frac{|\tau^{(k)}|}{\tau_{c\pm}^{(k)}}}, \quad l^{(k)} = \alpha \frac{1}{\sqrt{\beta \sum_{l=1}^n \rho_{bar}^{(kl)} + \delta \sum_{l=1}^n \rho^{(l)}}}.$$

Здесь: $\Delta F_*^{(k)}$, $\Delta G_*^{(k)}$ — зависящие от свойств решётки энергии активации движения дислокаций, соответственно, в отсутствие напряжений и при действии касательного напряжения на СС; k_B — константа Больцмана; θ — абсолютная температура; H — функция Хэвисайда; $l^{(k)}$ — средняя длина свободного пробега дислокации на k -й СС; v — дебаевская частота

(максимальная частота, с которой могут колебаться атомы около своих положений равновесия); g , α , β , δ — безразмерные параметры, определяемые из процедуры идентификации.

При изотермическом пластическом деформировании происходит образование новых дислокаций, в качестве их источников принимаются источники Франка–Рида, генерирующие замкнутые расширяющиеся петли дислокаций. Из экспериментов известно, что источник может испускать ограниченное число петель. В работе для описания генерации дислокаций вводится плотность источников Франка–Рида $\rho_{src}^{(k)}$, изменение которой представляется следующим соотношением:

$$\dot{\rho}_{src}^{(k)} = \sum_j L \rho_{bar}^{(kj)} \rho^{(j)} \left[l^{(j)} v \exp\left(-\Delta G_*^{(j)} / k_B \theta\right) \text{H}\left(\left|\tau^{(j)}\right| - \tau_c^{(j)}\right) \right], \quad (3.5)$$

$$\rho_{0src}^{(k)} = \rho_{0src},$$

где L — расстояние между препятствиями в источнике, $\rho_{bar}^{(kj)}$ — плотность барьеров на пересечении k -й и j -й СС (затрудняющая или препятствующая движению дислокаций по каждой из этих СС), ρ_{0src} — начальная плотность барьеров. Вклад источника в увеличение плотностей дислокаций пропорционален текущей плотности петель и отличен от нуля только при активации источника, критерием которой является превышение действующими касательными напряжениями критических напряжений τ_{src} [22]:

$$\dot{\rho}_{nuc}^{(k)} = r_{av} \rho_{src}^{(k)} v \left\langle \frac{\left|\tau^{(k)}\right|}{\tau_{src}} - 1 \right\rangle^p, \quad (3.6)$$

$$\tau_{src} = \frac{A \mu b}{2 \pi L} \left(\ln \frac{L}{r_0} + B \right).$$

Здесь: r_{av} — средний радиус петли; v — дебаевская частота; A , B , p — безразмерные параметры материала; μ — модуль сдвига; b — модуль вектора Бюргерса; r_0 — минимальная длина закрепленного сегмента, способного

генерировать дислокационные петли; $\langle x \rangle = xH(x)$ — оператор (скобки Маколея).

Аннигиляция дислокаций происходит в результате реакции дислокаций разных знаков, расположенных в одинаковых СС. Реакция возможна в случае, если две дислокации противоположных знаков оказались на малом расстоянии. Это явление играет большую роль в процессах деформирования, особенно при реверсивном нагружении. Дислокации разных знаков, принадлежащие одной СС, притягиваются; две дислокации разных знаков на параллельных СС могут переползать по направлению друг к другу, и аннигилировать при сближении на расстояние h_{ann} . Количество прореагировавших дислокаций в единицу времени пропорционально заметаемому дислокацией объёму (на единицу длины дислокации) и плотности дислокаций на СС. Для описания аннигиляции в работе предлагается использовать следующее соотношение [62]:

$$\dot{\rho}_{\pm}^{(k)ann} = -h_{ann}\rho_{+}^{(k)}\rho_{-}^{(k)}\left|V_{+}^{(k)} - V_{-}^{(k)}\right|. \quad (3.7)$$

3.3. Формирование барьеров на расщеплённых дислокациях; дислокационно-ориентированный закон упрочнения

Для описания зарождения и эволюции барьеров (в настоящей работе — для ГЦК — кристаллов) была построена матрица взаимодействия расщеплённых дислокаций R_{bar}^{kl} , в которой единичные значения компонент стоят на пересечении строки k и столбца l , означающих номера СС, в которых залегают расщеплённые дислокации, реагирующие при пересечении с образованием барьеров Ломера–Коттрелла и/или Хирта; остальные компоненты матрицы R_{bar}^{kl} нулевые (таб. 3.1).

Скорость изменения плотности барьеров на реагирующих системах зависит от плотности дислокаций, действующих касательных напряжений и температуры [39]:

$$\dot{\rho}_{bar}^{(kl)} = \psi x_d R_{bar}^{kl} \rho^{(l)} \rho^{(k)} \left[l^{(k)} v \exp\left(-\Delta G_*^{(k)} / k_B \theta\right) \right], \quad (3.8)$$

$$x_d = \frac{b}{8\pi\varepsilon_{SFE}} = \frac{b^2 G}{8\pi\gamma_{SFE}}, \quad (3.9)$$

где ψ — безразмерный параметр, характеризующий скорость образования барьеров для конкретного материала (определяется в процессе идентификации), x_d — средняя ширина расщепления дислокации, ε_{SFE} — безразмерная величина энергии дефекта упаковки (ДУ) ($\varepsilon_{SFE} = \gamma_{SFE} / (Gb)$), γ_{SFE} — энергия ДУ).

Таблица 3.1 Матрица R_{bar}^{kl} , отражающая реакции с образованием барьеров Ломера –Коттрелла и Хирта дислокаций соответствующих систем скольжения ГЦК кристаллов

| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| 1 | 0 | 0 | 0 | ЛК | Х | 0 | 0 | 0 | 0 | Х | 0 | ЛК |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | ЛК | Х | 0 | ЛК | 0 | Х |
| 3 | 0 | 0 | 0 | Х | ЛК | 0 | Х | ЛК | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | ЛК | 0 | Х | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | Х | ЛК |
| 5 | Х | 0 | ЛК | 0 | 0 | 0 | 0 | ЛК | Х | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | Х | ЛК | 0 | ЛК | Х |
| 7 | 0 | ЛК | Х | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | ЛК | Х | 0 |
| 8 | 0 | Х | ЛК | 0 | ЛК | Х | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | Х | ЛК | 0 | 0 | 0 | Х | ЛК | 0 |
| 10 | Х | ЛК | 0 | 0 | 0 | 0 | ЛК | 0 | Х | 0 | 0 | 0 |
| 11 | 0 | 0 | 0 | Х | 0 | ЛК | Х | 0 | ЛК | 0 | 0 | 0 |
| 12 | ЛК | Х | 0 | ЛК | 0 | Х | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Матрица плотностей барьеров на СС содержит данные обо всех барьерах, которые могут появиться на расщеплённых дислокациях (так, для ГЦК решётки их 24) [8, 9, 30]. Компоненты матрицы $\dot{\rho}_{bar}^{(kl)}$ описывают скорости изменения плотностей барьеров, возникших на пересечении дислокаций, принадлежащим k -м и l -м СС; таким образом, могут быть установлены

плотности барьеров, образующихся в ходе реакций и являющихся компонентами матрицы R_{bar}^{kl} , позволяющей учитывать взаимодействие дислокаций обоих знаков.

При формулировке закона упрочнения принимается гипотеза о возможности аддитивного разделения критических напряжений СС (скоростей их изменения) на вклады от сопротивления решётки (величина, зависящая только от температуры), от полей напряжений дислокаций и от образованных на расщеплённых дислокациях барьеров [101, 136]. Для определения составляющей, описывающей влияние накопленных дефектов, оценивалось взаимодействие полей напряжений дислокаций различных СС друг с другом. Для этого использовалось известное [35] решение для поля напряжений одиночной дислокации и его действие на другую дислокацию в изотропной упругой среде. На его основе строилась матрица M^{ki} , позволяющая оценить напряжения взаимодействия дислокаций k -й и i -й СС, которые заносятся на пересечении k -й строки и i -го столбца матрицы M^{ki} (Таблица 3.2). Компоненты матриц были нормированы на начальные критические напряжения соответствующих систем скольжения (напряжения Пайерлса) $\tau_{c0}^{(k)} = \tau_{c_lat}^{(k)}$ и являются безразмерными величинами.

Таблица 3.2 Компоненты матрица M^{ki} , определяющие напряжения взаимодействия дислокаций k -й и i -й систем скольжения ГЦК кристаллов

| СС | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
|----|-------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 1 | 0,19 | 0,36 | 0,36 | 0,01 | 0,57 | 0,4 | 0,31 | 0 | 1 | 0 | 0,35 | 0,09 |
| 2 | 0,36 | 0,19 | 0,36 | 0,36 | 0 | 0,57 | 0,36 | 0,01 | 0,19 | 0,25 | 0,36 | 0 |
| 3 | 0,36 | 0,36 | 0,19 | 0,32 | 0,3 | 0 | 0 | 0,35 | 0,36 | 0,36 | 0,01 | 1 |
| 4 | 0,008 | 0,36 | 0,32 | 0,19 | 0,36 | 0,36 | 0 | 1 | 0,19 | 0 | 0,36 | 0,21 |
| 5 | 0,57 | 0 | 0,3 | 0,36 | 0,19 | 0,36 | 0,32 | 0 | 0,36 | 0,19 | 0,19 | 0,01 |
| 6 | 0,4 | 0,57 | 0 | 0,36 | 0,36 | 0,19 | 0,16 | 0,01 | 0,19 | 0,36 | 0 | 1 |

| | | | | | | | | | | | | |
|----|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 7 | 0,31 | 0,36 | 0 | 0 | 0,32 | 0,16 | 0,19 | 0,36 | 0,36 | 0,01 | 0,57 | 0,4 |
| 8 | 0 | 0,01 | 0,35 | 1 | 0 | 0,01 | 0,36 | 0,19 | 0,36 | 0,57 | 0 | 0,36 |
| 9 | 1 | 0,19 | 0,36 | 0,19 | 0,36 | 0,19 | 0,36 | 0,36 | 0,19 | 0,4 | 0,36 | 0 |
| 10 | 0 | 0,25 | 0,36 | 0 | 0,19 | 0,36 | 0,01 | 0,57 | 0,4 | 0,19 | 0,36 | 0,36 |
| 11 | 0,35 | 0,36 | 0,01 | 0,36 | 0,19 | 0 | 0,57 | 0 | 0,36 | 0,36 | 0,19 | 0,36 |
| 12 | 0,09 | 0 | 1 | 0,21 | 0,01 | 1 | 0,4 | 0,36 | 0 | 0,36 | 0,36 | 0,19 |

Для оценки упругих напряжений, которые создаёт барьер на расщепленных дислокациях, необходимо рассмотреть комплекс, состоящий из трёх частей – двух частичных дислокаций и одной сидячей дислокации. Частичная дислокация имеет винтовую и краевую составляющие. Образование барьера Ломера–Коттрелла может происходить при взаимодействии двух расщеплённых дислокаций (Рис. 3.3, 3.4).

$$\begin{aligned}
 DB &= D\gamma + \gamma B, \\
 BC &= B\delta + \delta C, \\
 DB + BC &= D\gamma + \gamma B + B\delta + \delta C = D\gamma + \gamma\delta + \delta C.
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

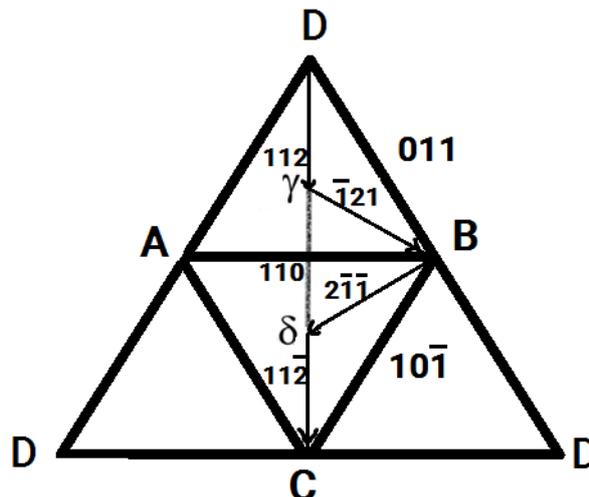


Рисунок 3.3 Расщеплённые дислокации DB и BC, иллюстрация к образованию сидячей дислокации $\gamma\delta$ в кристаллографической системе координат

Образование сидячей дислокаций на двух расщеплённых дислокациях DB и BC описывается следующими соотношениями (в компонентном виде):

$$\begin{aligned} \frac{a}{2}[011] &= \frac{a}{6}[112] + \frac{a}{6}[\bar{1}21]; \\ \frac{a}{2}[10\bar{1}] &= \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] + \frac{a}{6}[11\bar{2}]; \\ \frac{a}{6}[\bar{1}21] + \frac{a}{6}[2\bar{1}\bar{1}] &= \frac{a}{6}[110]. \end{aligned} \quad (3.11)$$

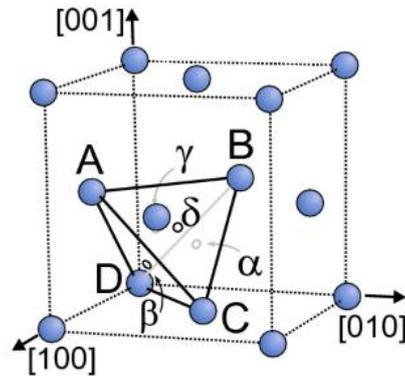


Рисунок 3.4 Схематическое изображение тетраэдра Томпсона

При описании реакции образования барьера необходимо рассмотреть изменение вектора Бюргерса дислокации в ходе расщепления двух полных дислокаций на частичные. Длина вектора Бюргерса краевой дислокации $\mathbf{b}_{кр}$ равна $\frac{a\sqrt{2}}{2}$. При этом дислокация $\gamma\delta$ имеет направление вектора Бюргерса, совпадающее с дислокацией DC. Данная дислокация не может совершать скольжение по причине того, что она является частью дефекта, включающего частичные дислокации $D\gamma$ и δC , как жёсткой системы, движение которой как целого невозможно. Важно отметить, что частичные дислокации имеют две составляющие: краевую и винтовую, причём длина вектора Бюргерса каждой из этих дислокаций меньше длины полной дислокации (Рис. 3.5).

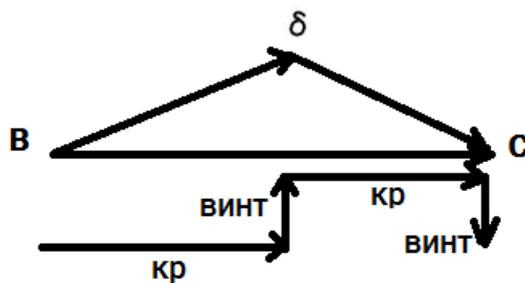


Рисунок 3.5 Схематическое изображение краевой и винтовой составляющих частичных дислокаций $B\delta$ и δC

Длина векторов Бюргера $|\mathbf{b}_{\text{част}}|$ частичных дислокаций одинакова и может быть определена скалярным произведением вектора частичной дислокации на единичный вектор в направлении исходной расщепившейся дислокации \mathbf{b} :

$$\mathbf{b}_{\text{част}} = \frac{a}{6}[\bar{1}21] \cdot [0\frac{\sqrt{2}}{2}\frac{\sqrt{2}}{2}] = \frac{a}{6}[0\sqrt{2}\frac{\sqrt{2}}{2}], \quad (3.12)$$

$$|\mathbf{b}_{\text{част}}| = \sqrt{\mathbf{b}_{\text{част}} \cdot \mathbf{b}_{\text{част}}} = \frac{a}{6}\sqrt{\frac{5}{2}}.$$

Для определения длины вектора Бюргера $\mathbf{b}_{\text{винт}}$ винтовой составляющей частичной дислокации можно использовать свойство ортогональности винтовой и частичной составляющих частичную дислокацию:

$$\mathbf{b}_{\text{винт}} = \frac{a}{6}[\bar{1}21] - \frac{a}{6}[0\sqrt{2}\frac{\sqrt{2}}{2}] = \frac{a}{6}[\bar{1}; 2 - \sqrt{2}; 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}],$$

$$|\mathbf{b}_{\text{винт}}| = \frac{a}{6}\sqrt{[\bar{1}; 2 - \sqrt{2}; 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}] \cdot [\bar{1}; 2 - \sqrt{2}; 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}]} = \quad (3.13)$$

$$= \frac{a}{6}\sqrt{1 + 4 - 4\sqrt{2} + 2 + 1 - \sqrt{2} + 0.5} = \frac{a}{6}\sqrt{8.5 - 5\sqrt{2}}.$$

Величина вектора Бюргера $|\mathbf{b}_{\text{сид}}|$ сидячей дислокации $\gamma\delta$, имеющей только краевую компоненту, определяется её компонентами в ортонормированном базисе КСК:

$$\mathbf{b}_{\text{сид}} = \frac{a}{6}[110], \quad (3.14)$$

$$|\mathbf{b}_{\text{сид}}| = \sqrt{\mathbf{b}_{\text{сид}} \cdot \mathbf{b}_{\text{сид}}} = \frac{a\sqrt{2}}{6}.$$

При оценке величины поля упругих напряжений, порождаемых барьером Ломера–Коттрелла, необходимо определить напряжения от каждого сегмента барьера $\sigma_{\text{кр}1}, \sigma_{\text{сид}}, \sigma_{\text{кр}2}$ (двух частичных дислокаций $D\gamma, \delta C$ и сидячей $\gamma\delta$). Для этого были использованы известные решения для определения напряжений от дислокаций в изотропной упругой среде. Заметим, что все приведенные ниже решения записаны в одинаковых обозначениях «собственных» декартовых ортогональных систем координат,

общепринятых в ФТТ при определении компонент напряжений (построенных на трёх базисных векторах: векторе Бюргера, нормали к плоскости скольжения и векторе экстраплоскости). При определении суммарного поля напряжений от совокупности трех указанных дислокаций требуется перейти в единую систему координат. Для расщепленных дислокаций компоненты тензоров напряжений определяются с учётом краевой и винтовой составляющих следующими соотношениями:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} = -\frac{Gb_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yy} = \frac{Gb_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}); \\ \sigma_{xy} = \frac{Gb_{кр}}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2} - \frac{Gb_{винт}}{2\pi} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2}; \\ \sigma_{yz} = \frac{Gb_{винт}}{2\pi} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2}; \\ \sigma_{xz} = 0. \end{array} \right. \quad (3.15)$$

Напряжения от вершинной дислокации определяется следующими соотношениями:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_{xx} = -\frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(3x^2 + y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{y(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{zz} = \nu(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}); \\ \sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x(x^2 - y^2)}{(x^2 + y^2)^2}; \\ \sigma_{yz} = \sigma_{xz} = 0. \end{array} \right. \quad (3.16)$$

Для определения величины влияния данного барьера на дислокацию необходимо установить тензорную сумму всех трех составляющих:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_{кр1} + \boldsymbol{\sigma}_{сид} + \boldsymbol{\sigma}_{кр2}. \quad (3.17)$$

Для вычисления необходимо перевести компоненты каждого из трех тензоров напряжений от дислокаций, составляющих барьера, в единую

декартову ортогональную систему координат, которую предлагается связать с исходной дислокацией (перед ее расщеплением).

Выберем в качестве такой единой системы координат «собственную» систему дислокации ВС (Рис.3.3). Для нахождения поля напряжений барьера, образованного дислокациями $D\gamma, \gamma\delta, \delta C$, после определения компонент тензоров упругих напряжений $\sigma_{D\gamma}, \sigma_{\gamma\delta}, \sigma_{\delta C}$, вычисленных с учётом длин векторов Бюргера в «собственных» системах координат каждой из дислокаций, вводятся преобразования поворотов для определения компонент в базисе единой системы координат дислокации ВС. Для совмещения базисных векторов систем координат дислокации ВС и частичной дислокации $D\gamma$ необходимо произвести поворот последней на угол 120° вокруг оси $[1-10]$ и 150° вокруг оси $[111]$. Для совмещения систем координат дислокации ВС и частичной дислокации δC необходимо произвести поворот триэдра базисных векторов последней на угол 150° вокруг оси $[111]$. Для совмещения базисных триэдров систем координат дислокации ВС и сидячей дислокации $\gamma\delta$ необходимо произвести поворот базиса последней на угол 150° вокруг оси $[1-10]$ и на 30° вокруг оси $[111]$.

Учет всех возможных барьеров и их влияния на дислокации различных систем скольжения позволяет построить матрицу B^{ki} , компоненты которой дают возможность определить изменения критических напряжений за счёт влияния барьеров на расщеплённых дислокациях. Компоненты этой матрицы также нормируются на начальные критические напряжения соответствующих СС (на напряжения Пайерлса) $\tau_{c0}^{(k)} = \tau_{c_lat}^{(k)}$ и используются в алгоритме реализации модели в качестве безразмерных величин.

С использованием принятых матриц эволюционные соотношения для изменения критического напряжения сдвига и его составляющих можно записать в следующем виде [101, 8, 80]:

$$\begin{aligned}
\tau_{c0}^{(k)} &= \tau_{c_lat}^{(k)}, \\
\dot{\tau}_c^{(k)} &= \dot{\tau}_{c_dis}^{(k)} + \dot{\tau}_{c_bar}^{(k)}, \\
\dot{\tau}_{c_dis}^{(k)} &= \alpha b \tau_{c0}^{(k)} \sum_{i=1}^n \frac{M^{ki}}{2\sqrt{\rho^{(i)}}} \dot{\rho}^{(i)}, \\
\dot{\tau}_{c_bar}^{(k)} &= \beta b \tau_{c0}^{(k)} \sum_{i=1}^n \frac{B^{ki}}{2\sqrt{\rho_{bar}^{(ki)}}} \dot{\rho}_{bar}^{(ki)},
\end{aligned} \tag{3.18}$$

где α, β — безразмерные параметры материала.

Используя предложенную концептуальную и математическую постановки, можно дать следующее краткое описание общей структуры модели, структурно-масштабных уровней и связей между ними. Представительный объём материала включает конечное множество (несколько сотен) элементов мезоуровня-1 (кристаллитов), имеющих различные ориентации решётки по отношению к характерным осям нагружения (и к осям лабораторной системы координат); каждый элемент мезоуровня-1 по масштабу совпадает с элементом мезоуровня-2. С макроуровня на мезоуровень-1 передаются воздействия (градиент скорости перемещений, температура). На мезоуровне-1 процессы деформирования рассматриваются в терминах механических переменных (в напряжениях, деформациях, их скоростях). С мезоуровня-1 на мезоуровень-2 в качестве воздействия передаются касательные напряжения, действующие на СС, и температура; описание на мезуровне-2 осуществляется в терминах плотностей и скоростей движения дислокаций. По величинам последних из уравнения Орована отыскиваются скорости сдвигов по СС и неупругая составляющая меры скорости деформации, которые транслируются на мезоуровень-1. На мезоуровне-1 по полному градиенту скорости перемещений и его неупругой составляющей устанавливается спин жёсткой подвижной системы координат и скорости изменения напряжений (с использованием упругого закона в скоростной релаксационной форме). Осреднением по элементам мезоуровня-1 определяются скорости изменения напряжений на макроуровне.

3.4 Алгоритм реализации модели

Следует отметить, что в силу существенной нелинейности задачи (геометрической и физической), для решения используется пошаговая процедура нагружения: весь рассматриваемый временной интервал представляется совокупностью шагов по времени, при этом значения величины шагов устанавливаются из численных экспериментов из условия сходимости результатов. Перед инициацией расчетов задаются необходимые начальные условия и материальные параметры для переменных всех уровней; принимается, что в исходном состоянии материал находится в естественной конфигурации. Нагружение реализуется кинематически, считается заданными градиент скорости перемещений макроуровня $\hat{\nabla}V(t)$ и температура как непрерывные соответственно тензор- и скалярнозначная функции времени t . Отметим, что при использовании модели для анализа конкретных процессов деформирования параметры воздействия в каждый момент времени устанавливаются из решения соответствующих краевых задач.

На каждом шаге по времени задаваемые на макроуровне кинематические и температурные воздействия передаются на мезоуровень-1. В результате решения задачи на мезоуровнях 1 и 2 определяются значения всех внутренних переменных (ВП), в том числе явных, т.е. входящих в определяющие соотношения рассматриваемого уровня; список и классификация ВП приведены в таблице 3.3.

Таблица 3.3 Список и классификация ВП модели

| Уровень | Внешние воздействия | | Тензор скорости деформации (внешнее воздействие) | Функция времени (заданная или определяемая из решения краевой задачи) |
|---------|---------------------|----------|--|---|
| Макро | Явные | Σ | Тензор напряжений Коши | Осреднение отклика элементов мезоуровня-1 |
| Мезо-1 | Явные | Z | Мера скорости деформации | Воздействие на элементы мезоуровня-1 |

| | | | | |
|------------------|---------|---------------------------------------|--|---|
| Мезо-1 | Явные | σ | Тензор напряжений Коши | Определяется интегрированием для каждого кристаллита на каждом шаге |
| Мезо-1 | Явные | ω | Тензор спина | Определяется для каждого кристаллита на каждом шаге |
| Мезо-1 | Неявные | $\dot{\gamma}^{(k)}$ | Скорость сдвигов на k -й СС | Определяется по отклику с мезо-2 |
| Мезо-1 | Явные | \mathbf{z}^e , \mathbf{z}^{in} | Мера скорости деформации (упругая и неупругая части) | Определяется по отклику с мезо-2 |
| Мезо-1 | Неявные | \mathbf{o} | Ориентационный тензор решетки | Определяется интегрированием по ω |
| Мезо-1 Мезо-2 | Неявные | $\tau^{(k)}$ | Касательные напряжения на k -й СС | Определяется по σ , воздействие на мезо-2 |
| Мезо-2 | Явные | $V_{\pm}^{(k)}$ | Средние скорости скольжения на k -й СС | Определяется по $\tau^{(k)}$ |
| Мезо-2 | Явные | $\rho_+^{(k)}$, $\rho_-^{(k)}$ | Плотности дислокаций (+ и -) на k -й СС | Определяется из эволюционных уравнений |
| Мезо-2 | Неявные | $\rho_{bar}^{(k)}$ | Плотности барьеров на k -й СС | Определяется из эволюционных уравнений |
| Мезо-2 | Неявные | $\tau_c^{(k)}$ | Величина критических напряжений на k -й СС | Сумма $\tau_{c_dis}^{(k)}$ и $\tau_{c_bar}^{(k)}$ |
| Мезо-2 | Неявные | $\tau_{c_dis}^{(k)}$ | Критические напряжения на k -й СС (от дислокаций) | Определяется по $\rho_+^{(k)}, \rho_-^{(k)}$ |
| Мезо-2 | Неявные | $\tau_{c_bar}^{(k)}$ | Критические напряжения на k -й СС (от барьеров) | Определяется по $\rho_{bar}^{(k)}$ |
| Все уровни | Явные | θ | Температура | Воздействия |

Как отмечено выше, при реализации модели в силу нелинейности задачи применяется пошаговая процедура. Полное время процесса $t \in [0, t_k]$

разбивается на ряд шагов, решение представляется в виде последовательности искомым переменных в моменты времени 0 (при начальных данных), Δt , $2\Delta t$, ..., $M\Delta t = t_k$. Величина шага Δt устанавливается из численных экспериментов с постепенным его уменьшением до достижения в момент t_k фробениусовой нормой разности тензоров макронапряжений, соответствующих двум последовательным временным шагам, значения, не превышающего на 1% наибольшую (из двух сравниваемых) интенсивностей напряжений. Перед началом расчётов задаются необходимые начальные условия и материальные параметры для переменных всех уровней. Следует особо выделить первый шаг нагружения. На нём, в силу предположения о естественном (ненапряженном и недеформированном) состоянии материала, в отсчётной конфигурации отклик кристаллитов определяется упругими соотношениями, следовательно, в этом случае достаточно ограничиться вычислениями только с использованием подмодели мезоуровня-1. Алгоритм решения задачи на мезо-1 и мезо-2 уровнях для каждого временного шага состоит из трех этапов (рис. 3.6):

- а)** Решение в скоростях. Задаваемые на макроуровне температура и градиент скорости перемещений передаются на мезоуровень-1 (используется гипотеза Фойгта). По компонентам тензора напряжений, определенным на конец предыдущего временного шага, определяются касательные напряжения в каждом элементе мезоуровня-1 (соотношение (5)). Осуществляется определение скоростей изменения ВП элементов мезоуровня-2, в том числе – скоростей движения дислокаций, а по ним – скоростей сдвигов по СС.
- б)** Интегрирование. Определение всех искомым переменных (включая внутренние переменные) на всех уровнях интегрированием их скоростей изменения на конец текущего – начало следующего шага по времени. Следует отметить, что при вычислениях первого этапа тензорные параметры мезо-1 и мезо-2 определены компонентами в базисах жестких подвижных

систем координат этого уровня (напомним, что мезо-1 и мезо-2 относятся к одному масштабному уровню).

в) Переопределение ВП уровней мезо-1 и мезо-2. Изменения ориентаций элементов мезо-1 и мезо-2, переопределение тензорных переменных данных уровней на конец рассматриваемого шага по времени («привязка» вычисленных компонент тензоров к измененным базисным векторам кристаллитов), определение компонент всех тензорных переменных в базе единой лабораторной системы координат, вычисление компонент тензора напряжений макроуровня (осреднением напряжений элементов мезоуровня-1).

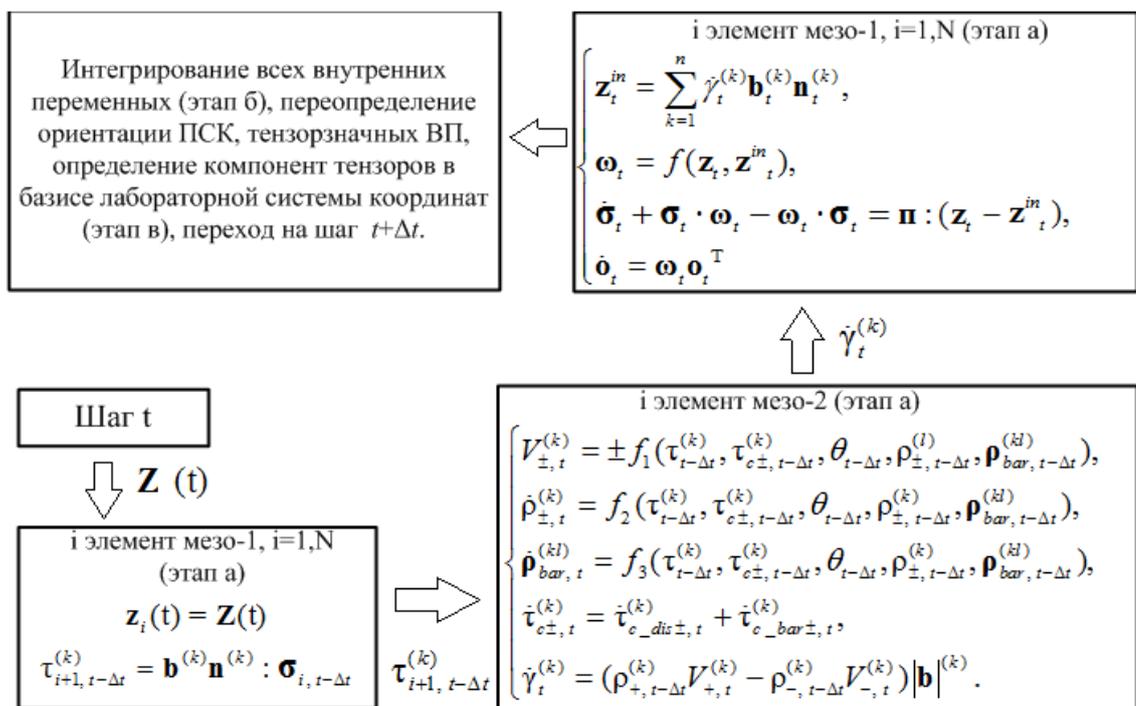


Рисунок 3.6 Схема к алгоритму реализации модели на произвольном шаге по времени

При реализации алгоритма важную роль играет выбор величины шага по времени: он определяется таким образом, чтобы в ходе реализации алгоритма решение было устойчиво – при последовательных уменьшениях его величины при реализации алгоритма изменения величин всех параметров состояния (в том числе – внутренних переменных) не должны превышать предписанных малых значений. Важной задачей является определение с

помощью известных экспериментальных данных для выбранных программ деформирования значений материальных параметров модели (характеристик материала на различных уровнях), называемая процедурой идентификации, а также проверка адекватности результатов расчетов с использованием найденных параметров для других видов нагружения, т.е. верификации модели. В предложенной модели, в частности, необходимо идентифицировать параметры закона упрочнения α, β (3.18). Процедура идентификации модели осуществляется по следующей схеме: модель используется для расчетов искомых переменных для некоторого процесса деформирования образцов из определенного материала, для которых известны результаты экспериментальных исследований; после этого результаты численного моделирования сравниваются с данными натуральных экспериментов, для чего вводятся соответствующие нормы разностей указанных данных, выступающие в качестве целевой функции задачи минимизации разностей. Для решения данной задачи используется метод прямого поиска Нелдера – Мида, заключающийся в изменении вектора искомых параметров идентификации (в определенном конечномерном пространстве) в направлении, приводящем к уменьшению целевой функции (разности результатов численного и натурального экспериментов). После проведения идентификации параметров осуществляется процедура верификации – применение модели с найденными параметрами к описанию процесса деформирования, отличного от исходного (отличаться могут программа деформирования, температурные условия).

Глава 4. Описание и анализ результатов моделирования сложного монотонного и циклического деформирования поликристаллических образцов

Разработанная модель использована для описания отклика поликристаллических макрообразцов с ГЦК-решёткой, подвергаемых простому и сложному циклическим нагружениям. Численные эксперименты проводились на модельных макрообразцах на:

- модельных макро-ПО меди и латуни (60% Cu и 40% Zn), имеющие различные значения компонент тензора упругих свойств, начального сопротивления решётки, величины ЭДУ, параметров закона упрочнения;
- макро-ПО нержавеющей стали SAE 310S с энергией ДУ 20 МДж/м².

4.1 Идентификация разработанной модели

В качестве примера проведения процедуры идентификации рассмотрим идентификацию и верификацию параметров модели для стали SAE 310S с энергией ДУ 20 МДж/м² и ГЦК решеткой. Идентификация параметров закона упрочнения осуществлялась на программах пропорционального и непропорционального (по эллиптической траектории деформации) циклических нагружений и сводилась к задаче нелинейного программирования, для решения которой применялся метод Нелдера – Мида; в качестве целевой функции $F(\cdot)$ выступал модуль разности вышедших на стационарные значения амплитуд интенсивностей напряжений, установленных экспериментально и с помощью предлагаемой модели:

$$F(\sigma_u(\mathbf{x})) = \max \left| \sum_{k=1}^i ((\sigma_u^k(\mathbf{x})) - \sigma_{u^{\varepsilon}}^k S_u^k) \right|, \quad (4.1)$$
$$F(\sigma_u(\mathbf{x})) \rightarrow \min,$$

где σ_u^k – значения интенсивности напряжений, определенных из численного эксперимента при параметрах модели \mathbf{x} и величине накопленных деформаций S^k , $\sigma_{u^{\varepsilon}}^k$ – значения интенсивности напряжений из данных натурального

эксперимента при величине накопленных деформациях s^k , где k – порядковый номер точки при фиксированных значениях накопленной деформации в натурном эксперименте.

Для решения задачи поиска параметров модели использовался широко известный метод Нелдера – Мида, также называемый методом деформируемого многогранника в пространстве параметров [37]. Данный метод относится к классу безусловной оптимизации функции от нескольких переменных, где в качестве функции оптимизации может быть использован произвольный функционал. Метод применим для нахождения экстремумов широкого класса функций, в котором функции непредставимы в аналитическом виде (а следовательно – отсутствует возможность определения градиентов целевой функции). В ходе поиска оптимального решения производится оценка функции в узлах многогранника (положения вершин которого определяются набором искомых параметров) конечномерного пространства параметров и последовательном перемещении и деформировании данного многогранника в направлении к точке экстремума. Данный метод позволяет находить локальный минимум, поэтому для подтверждения качества найденных параметров (вследствие невозможности доказать факт нахождения глобального минимума) обычно используется несколько начальных многогранников. Параметрами метода являются коэффициент отражения (использовался равный 1), коэффициент сжатия (использовался равный 0,5), и коэффициент растяжения (использовался равный 2) [37].

В ходе идентификации модели значение параметра $\alpha = 3,4$ закона упрочнения (3.18) определено с использованием данных экспериментов на простое циклическое деформирование (пропорциональное растяжение–сжатие и сдвиг), так как при простых нагрузениях упрочнение происходит в основном за счёт взаимодействия дислокаций. Параметры Ψ и β , входящие, соответственно, в соотношения (3.8) и (3.18), определялись с помощью численных экспериментов на сложное нагружение (по эллиптическим

траекториям), для которых присущи взаимодействия дислокаций пересекающихся СС с образованием барьеров Ломера–Коттрелла и Хирта; с использованием соответствующих экспериментальных данных из процедуры идентификации получены следующие значения: $\beta = 137,8$ и $\psi = 8,9 \cdot 10^{-5}$ [30].

Верификация модели выполнена с использованием экспериментальных данных по программам деформирования по траекториям деформаций в форме квадрата со стороной, соответствующей деформации в 0,5%; амплитудные значения интенсивности напряжений при выходе на стационарный режим в натурном эксперименте равнялись 432 МПа. Результаты моделирования дали значение 424,7 МПа, что позволяет считать модель применимой для исследования процессов сложного нагружения. Следует отметить, что в силу малой величины энергии ДУ для исследуемой стали характерно образование барьеров на расщеплённых дислокациях, что отражается на увеличении уровня упрочнения материалов с низкой энергией ДУ (по сравнению с материалами с высокой энергией ДУ при аналогичных программах нагружения). Средние плотности барьеров достигли порядка 10^5 м^{-2} для деформирования по траектории в форме квадрата, что превышает соответствующее значение на 38%, полученное для простого циклического нагружения, и на 33% – при нагружении по эллиптической траектории с аналогичными величинами амплитуды деформации (по интенсивности). Увеличение плотности барьеров наиболее активно происходит в диапазоне от 50 до 100% в абсолютных накопленных деформациях. При сравнении результатов расчетов с использованием модели с учётом и без учёта влияния образования барьеров показано, что при «выключении» вклада барьеров (без члена $\dot{\tau}_{c_bar}^{(k)}$ в законе упрочнения) уровень критических напряжений и интенсивностей напряжений понижается в зависимости от типа нагружения на 20–30%.

4.2 Описание и анализ результатов численных экспериментов: исследование нагружения образцов по простым и сложным циклическим траекториям деформации

Разработанная модель была применена для описания отклика поликристаллических макрообразцов с ГЦК-решёткой, подвергаемых простому и сложному циклическому нагружению. Представительный объем (ПО) макроуровня (аналог макрообразца) принимался состоящим из 343 кристаллитов с распределением их ориентаций в отсчетной конфигурации по равномерному закону. Численные эксперименты проводились на модельных макро-ПО латуни (60% Cu и 40% Zn) и чистого алюминия, имеющие различные значения компонент тензора упругих свойств, начального критического напряжений на СС (за счет сопротивления решётки), величины ЭДУ (155 МДж/м² для алюминия, 50 МДж/м² – для латуни), параметров закона упрочнения. Начальные плотности дислокаций полагаются одинаковыми и равными 10⁹ см⁻², начальные плотности барьеров равны нулю.

Нагружение в рассматриваемых численных опытах осуществлялось кинематически, исследовались эксперименты на простое и сложное циклическое нагружение, деформации ограничены максимальными амплитудными значениями по интенсивности деформаций. Основной целью исследования является анализ различия отклика материалов на отличающиеся по сложности нагружения, обнаруживаемые в натурных экспериментах [135, 41]. При малых градиентах перемещений можно пренебречь поворотами решеток кристаллитов и задавать нагружение в терминах малых деформаций и их скоростей. Кинематические воздействия заданы компонентами вектора в двухмерном подпространстве пятимерного векторного пространства деформаций Ильюшина. Для описания простого нагружения задавалась одна компонента вектора и коэффициент пропорциональности для определения второй компоненты, для описания

программ сложного нагружения задавались зависимости двух компонент вектора деформаций как непрерывные функции времени (рис. 4.1-4.3).

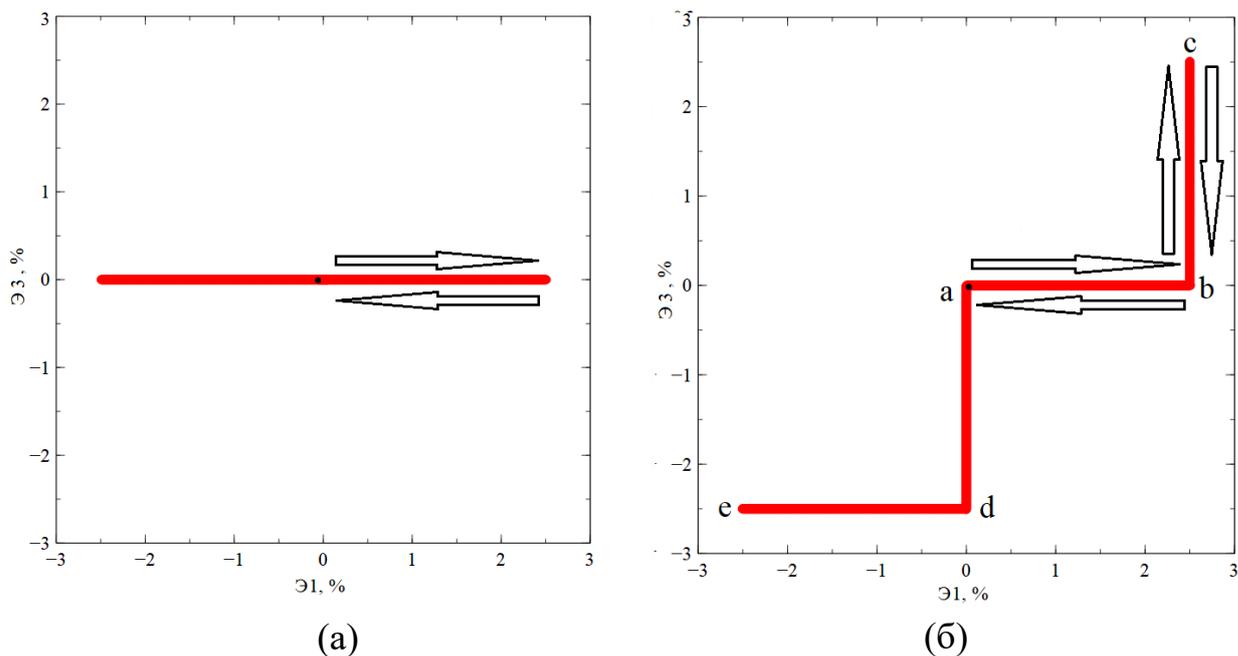


Рисунок 4.1. Программы нагружения на простое растяжение – сжатие (а) и по ступенчатой траектории (две ступени, (б), по траектории а-в-с-в-а-д-е-д-) в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А.

Илюшина

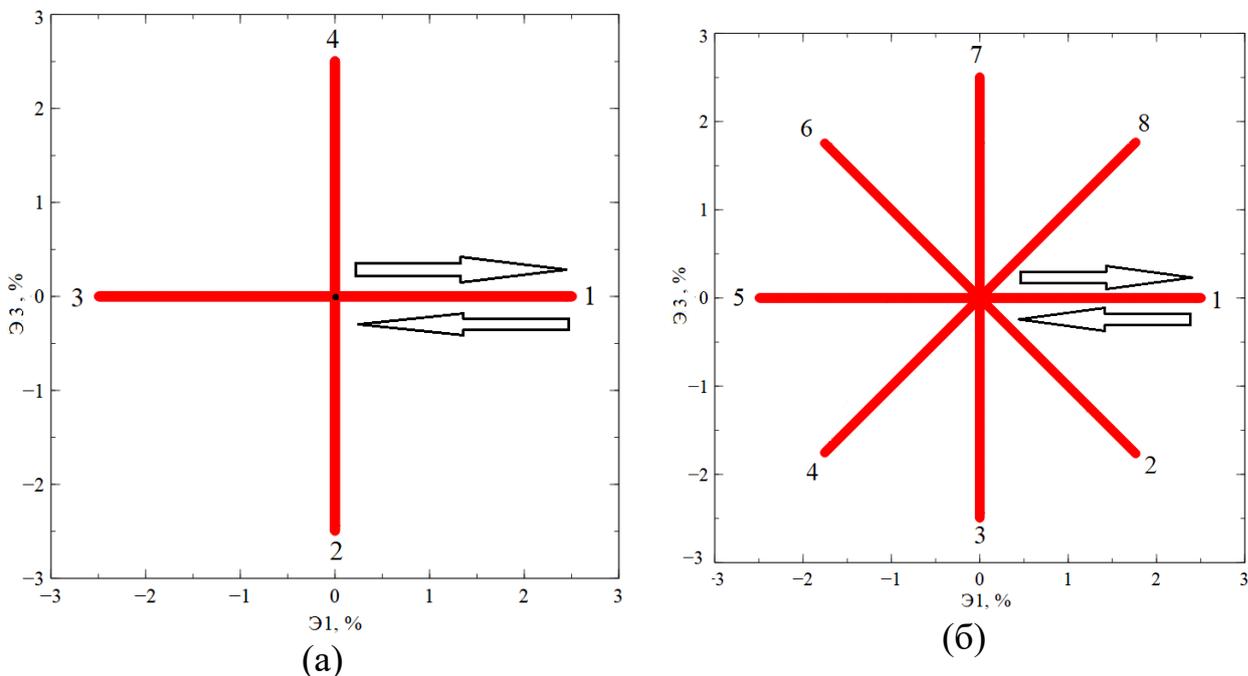


Рисунок 4.2 Программы нагружения по лучевым траекториям в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А.

Илюшина, 4 и 8 лучей

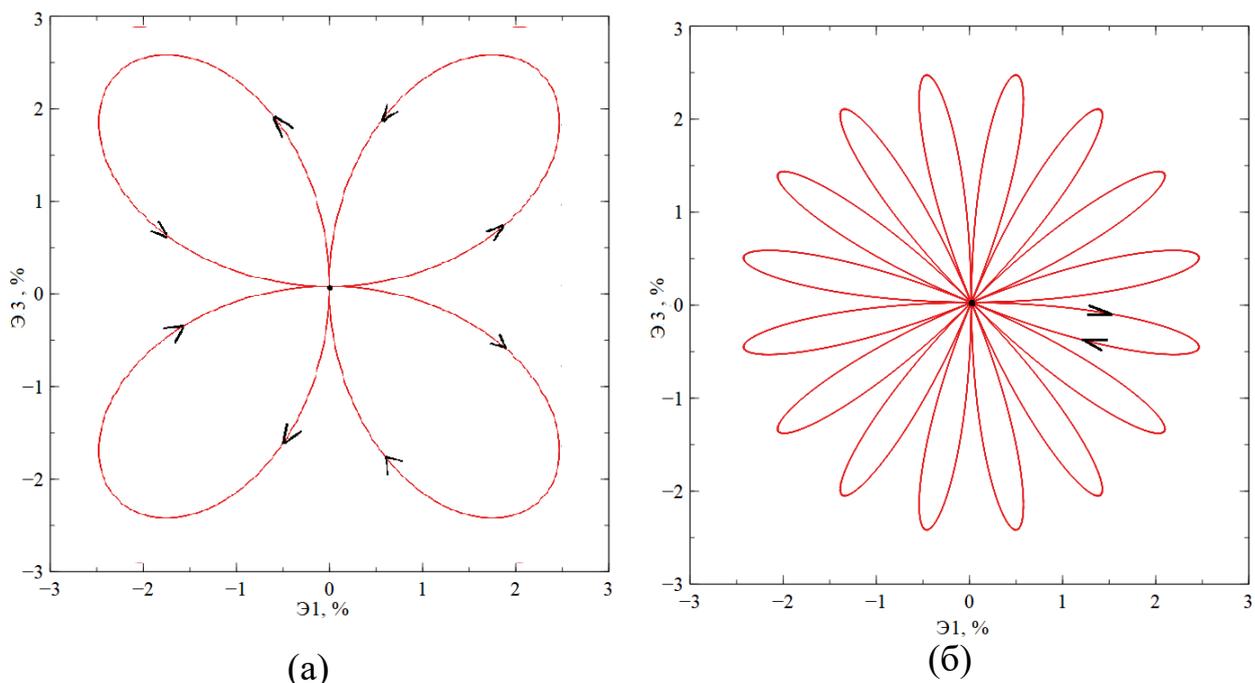
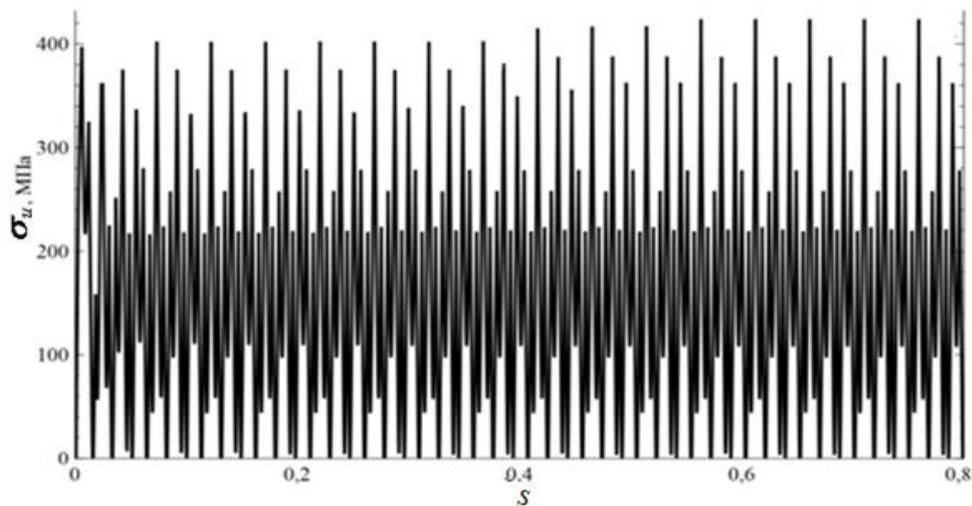


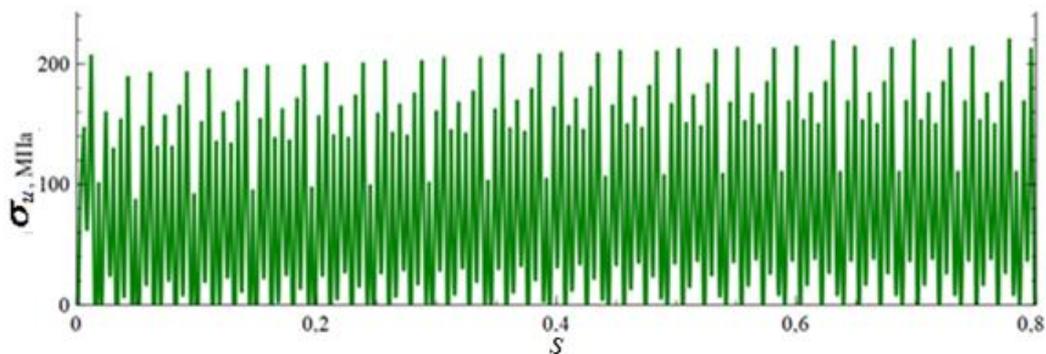
Рисунок 4.3 Программы нагружения по лепестковым траекториям в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А. Илюшина, 4 и 16 лепестков

Результаты численных экспериментов по исследованию циклического нагружения по лепестковой траектории представительных макрообъемов (макрообразцов) из латуни и алюминия представлены на рис.4.4. В численных экспериментах, реализованных с применением разработанной модели, по различным программам циклического нагружения, определялись максимальные интенсивности напряжений (после выхода на установившееся значение амплитудных напряжений в зависимости от накопленной деформации). Для определения величины дополнительного упрочнения из полученных максимальных интенсивностей напряжений вычитались максимальные интенсивности напряжений, полученные в экспериментах на простое циклическое нагружение (также при достижении стационарных значений), и относилось к ним, определяя таким образом величину дополнительного упрочнения в процентах к величине упрочнения при простом циклическом нагружении при идентичных амплитудах интенсивности деформаций. Результаты зависимости величины

дополнительного упрочнения от программы нагружения представлены в таблице 4.1.



(а)



(б)

Рисунок 4.4 Зависимость интенсивности напряжений в образцах из латуни (а) и алюминия (б) от накопленных деформаций по циклическим лепестковым траекториям в двумерном подпространстве пятимерного пространства А.А. Илюшина, 4 лепестка

Таблица 4.1. Дополнительное упрочнение поликристаллического образца из алюминия и латуни для различных программ нагружения

| Тип нагружения | ДЦУ алюминия, % | ДЦУ латуни, % | Амплитудные значения интенсивности напряжений при выходе на стационарный режим, МПа | |
|----------------|-----------------|---------------|---|--------|
| | | | алюминий | латунь |
| | | | | |

| | | | | |
|---------------------------|------|------|-------|-------|
| Растяжение-сжатие | 0,0 | 0,0 | 207,1 | 312,3 |
| Ступенчатое, 2 ступени | 0,6 | 5,1 | 208,4 | 328,1 |
| Ступенчатое, 4 ступени | 0,8 | 5,3 | 208,8 | 329 |
| Лучевые, 4 луча | 1,0 | 4,9 | 209,1 | 327,5 |
| Лучевые, 8 лучей | 1,8 | 5,3 | 210,8 | 328,9 |
| Лучевые, 16 лучей | 2,0 | 5,6 | 211,2 | 329,7 |
| Лепестковое, 4 лепестка | 12,6 | 31,8 | 233,1 | 411,6 |
| Лепестковое, 8 лепестков | 14,5 | 35,9 | 237,2 | 424,4 |
| Лепестковое, 16 лепестков | 15,3 | 37,5 | 238,8 | 429,5 |

Вторая группа численных экспериментов производилась по нагружению макро-ПО из стали AISI 304 (ГОСТ 08X18H10), результаты натуральных испытаний для образцов из этой стали приведены в [48].

На иллюстрациях (Рис. 4.5–4.6) изображены траектории деформации в двухмерном подпространстве пространства деформаций А.А. Ильюшина (\mathcal{E}_1 , \mathcal{E}_3) и зависимость интенсивности напряжений σ_{ii} от интенсивности накопленной деформаций s . На рисунках (позиция б) показаны зависимости интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций (область синего цвета); на вставках приведены увеличенные части графиков, с «растянутой» по интенсивности деформаций шкалой). Компоненты \mathcal{E}_1 и \mathcal{E}_3 определяются путём интегрирования компонент тензора скорости деформаций и перехода к векторным независимым переменным – компонентам вектора деформации в пятимерном пространстве \mathcal{E}_1 – \mathcal{E}_3 , определяемые по компонентам тензора малых деформаций [13].

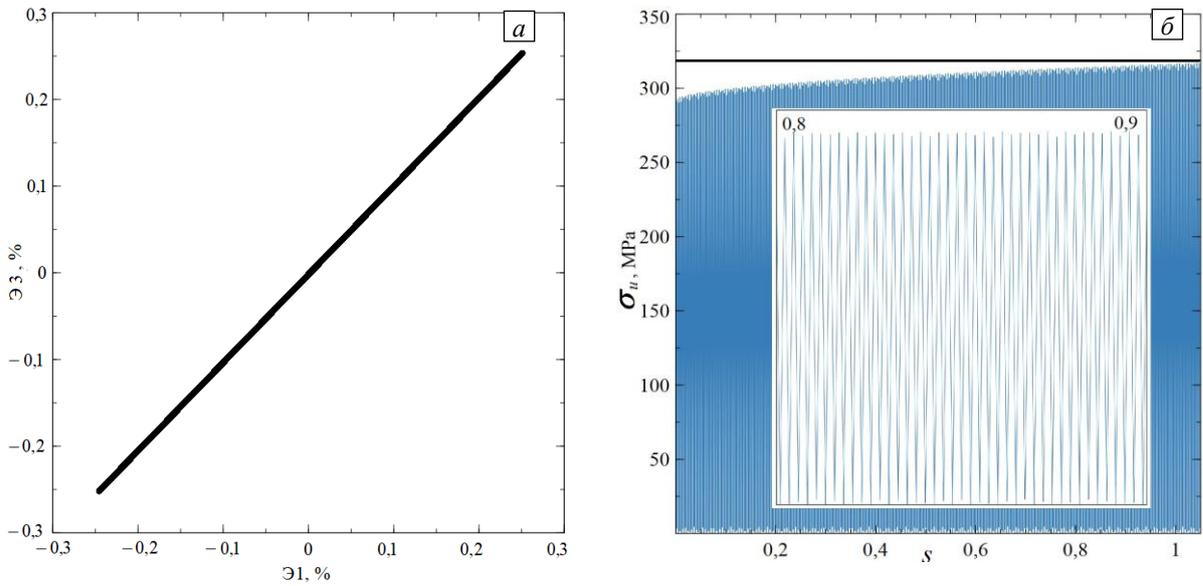


Рисунок 4.5. Траектория деформации при пропорциональном нагружении (растяжение–сжатие и знакопеременный сдвиг) (а) в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А. Ильюшина и зависимость интенсивности напряжений (б) от интенсивности накопленных деформаций при данном нагружении; прямая чёрная линия – уровень интенсивности напряжений при установившемся режиме

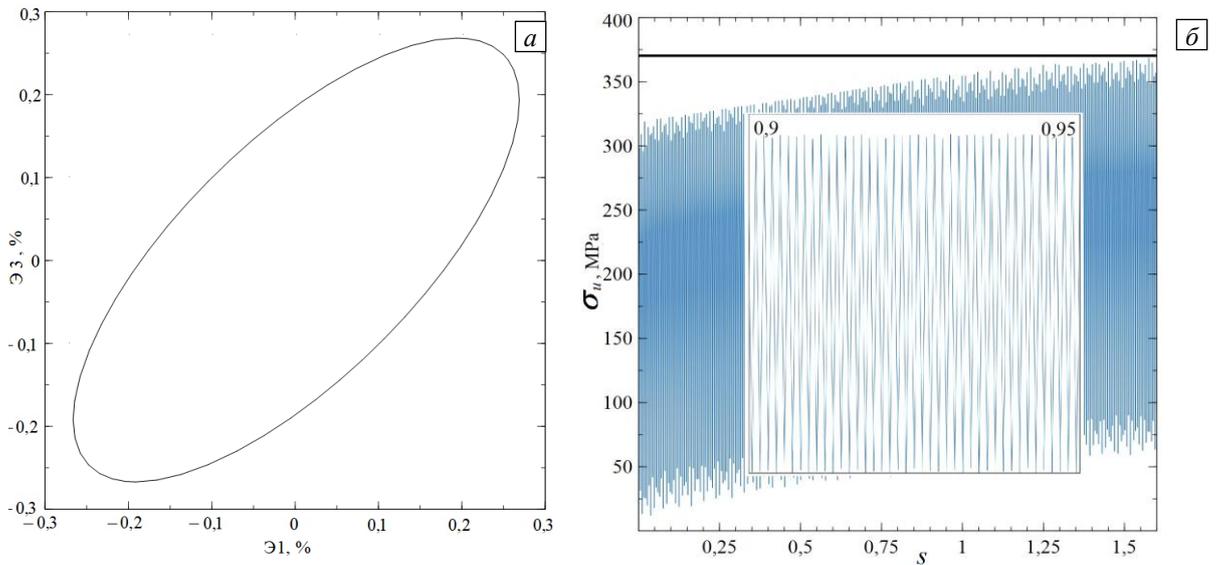


Рисунок 4.6 Траектория деформации при непропорциональном нагружении (растяжении–сжатии и знакопеременном сдвиге) в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А. Ильюшина (а) и зависимость интенсивности напряжений (б) при нагружении представительного макрообъёма стали от интенсивности накопленных деформаций; прямая чёрная линия – уровень амплитуды интенсивности напряжений при установившемся режиме

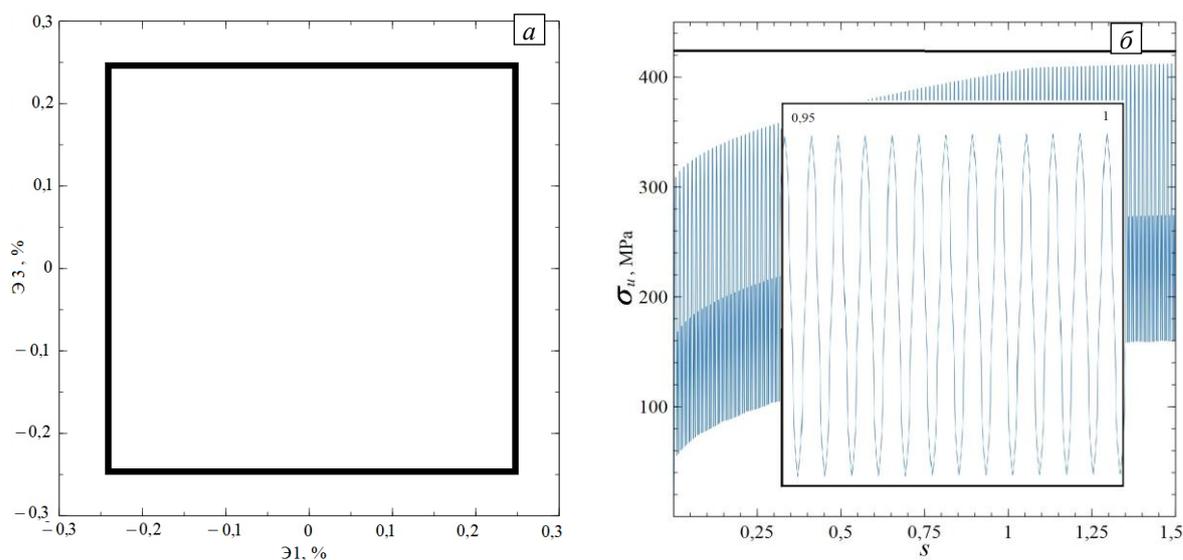


Рисунок 4.7. Траектория деформации в форме квадрата в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А. Ильюшина (а) и зависимость интенсивности напряжений (б) в представительном макрообъёме стали от интенсивности накопленных деформаций при указанном нагружении; прямая чёрная линия – уровень амплитуды интенсивности напряжений при установившемся режиме, определённый экспериментально

Наибольший интерес представляет оценка величины дополнительного циклического упрочнения при разных видах нагружения (при фиксированных одинаковых амплитудах интенсивности деформации) для материалов с различной энергией ДУ. Следует отметить, что для готовых изделий, как правило, допустимой областью эксплуатации является такое множество параметров их напряжённо-деформированного состояния, которые не выходят за пределы упругости. Область упругих деформаций обычно определяется условием Мизеса, формулируемым в терминах интенсивности напряжений и напряжения течения. Если на заключительных стадиях изготовления изделий применяется циклическое нагружение, то с повышением предела текучести материала увеличивается диапазон допустимых воздействий (напряжений и деформаций) при их последующей эксплуатации. В ходе численных экспериментов с использованием заданных кинематических воздействий находились максимальные интенсивности

напряжений (после выхода на стационарные значения кривой «амплитудные напряжения–накопленные деформации»). При этом показано, что некоторых материалов циклическое деформирование по сложным траекториям приводит к существенному дополнительному (по сравнению с простым циклическим нагружением при тех же значениях амплитуды деформаций) упрочнению (см. Рис. 4.5-4.7, б). Это характерно для материалов с низкой энергией ДУ. Кривая «амплитуда интенсивности напряжения–интенсивность накопленных деформаций» (огибающая максимумов интенсивности напряжений на диаграмме циклического нагружения) выходит на стационарные значения при достижении интенсивностью накопленных деформаций величины от 90 до 140% (что соответствует примерно 40 циклам). Существенный вклад в повышение напряжения течения (упрочнение) вносит образование барьеров на расщеплённых дислокациях. Соответствие результатов расчёта экспериментальным данным из работ [93, 67, 69] (прямая чёрная линия, см. Рис. 4.5-4.7, б), подтверждает принципиальную применимость разработанной модели для описания процессов циклического (в том числе – сложного) нагружения материалов с различной величиной энергии ДУ. Найденные в процессе идентификации (с использованием данных по пропорциональному (по лучевой траектории) и непропорциональному (по эллиптической траектории) нагружению) параметры модели позволили получить количественно согласующиеся результаты для деформирования по замкнутому контуру в форме квадрата (в двумерном подпространстве пятимерного пространства деформаций А.А. Ильюшина): по амплитуде интенсивности напряжений в установившемся режиме различие теоретических и экспериментальных данных составляет около 2% (7,3 МПа).

Численные эксперименты были проведены также на модельных макро-ПО меди и латуни (60% Cu и 40% Zn), имеющие различные значения компонент тензора упругих свойств, начального сопротивления решётки, величины ЭДУ, параметров закона упрочнения. Значительное внимание было

уделено анализу эволюции плотностей дислокаций и барьеров на системах скольжения в зависимости от ЭДУ материалов и сложности нагружения образцов. Начальные плотности дислокаций полагаются одинаковыми, и равны 10^9 м^{-2} , начальные плотности барьеров равны нулю.

Численные эксперименты на простое и сложное нагружение образцов реализованы при кинематическом задании воздействий (комбинацией знакопеременных сдвигов и растяжения – сжатия), деформации принимаются ограниченными максимальными амплитудными значениями по интенсивности деформаций и одинаковыми в сопоставляемых вариантах расчетов для материалов с различной ЭДУ. Основной целью исследования является анализ различия отклика материалов (включая плотности дислокаций и барьеров на СС) на отличающиеся по сложности нагружения, которые обнаруживаются уже на ранних стадиях неупругого деформирования. При малых градиентах перемещений можно пренебречь поворотами решеток кристаллитов и задавать нагружение в терминах малых деформаций и их скоростей.

Результаты численных экспериментов на простое циклическое нагружение (растяжением – сжатием) макрообразцов из меди и латуни представлены на рис.4.8; следует отметить, что диаграммы для нагружений знакопеременным сдвигом и растяжением – сжатием практически не отличимы, поэтому здесь приведены только последние. В экспериментах на простое циклическое деформирование наблюдается известный из экспериментов факт выхода напряжений на стационарные значения при ограниченных амплитудах по деформациям (для рассматриваемого случая – 3%) за 20–40 циклов нагружения, для медного образца при нагружении сдвигом максимальные значения амплитуды напряжения составили 41,6 МПа, для латуни максимальные амплитудные напряжения – 50,3 МПа.

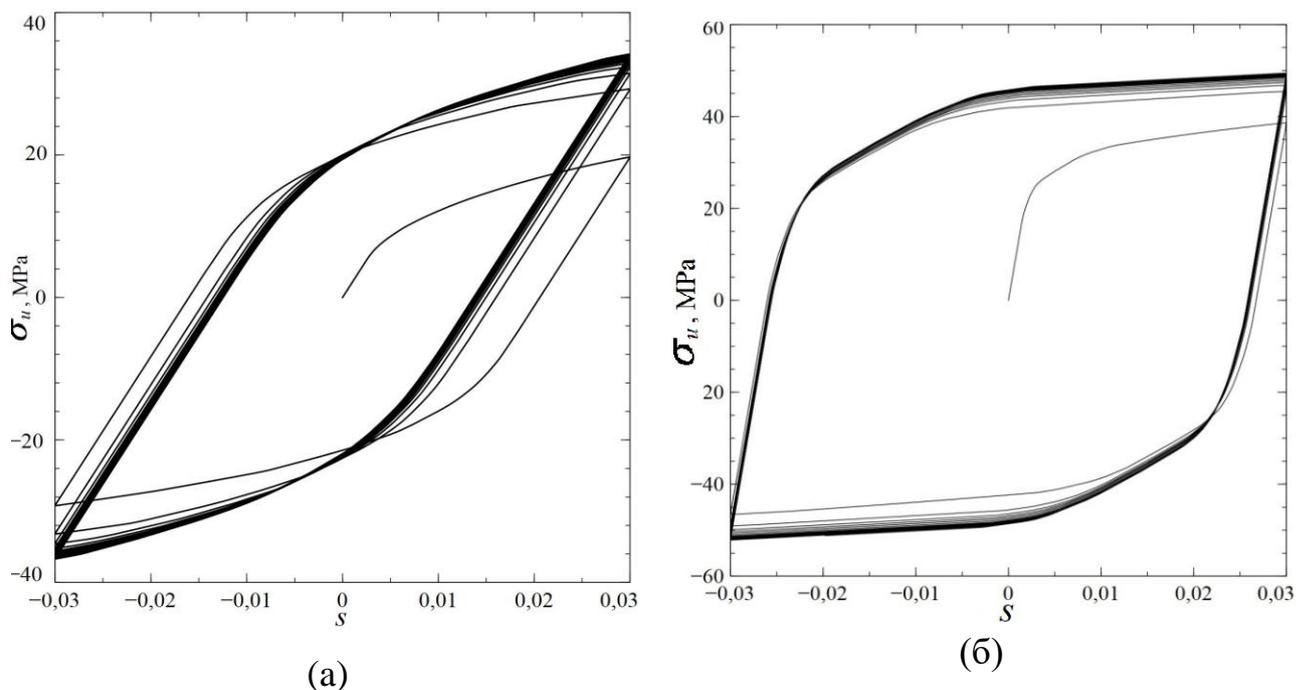
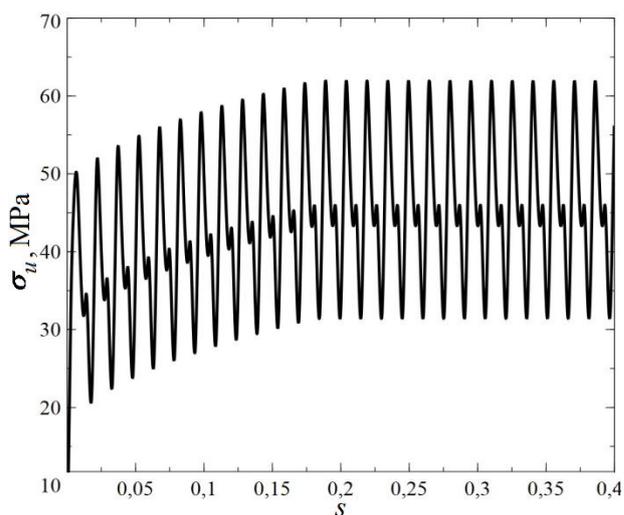
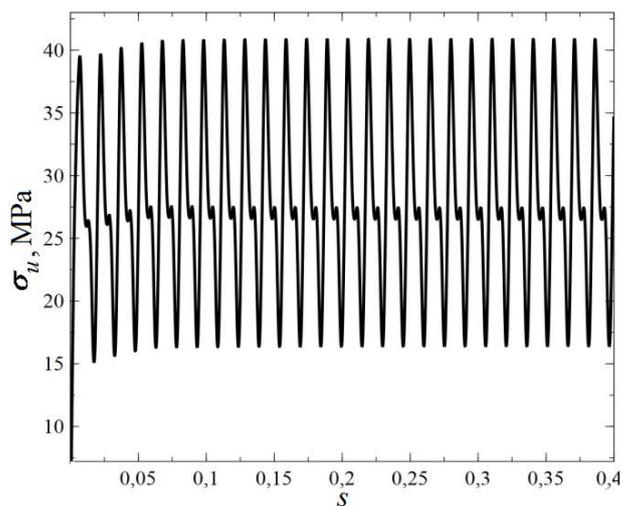


Рисунок 4.8 Зависимость интенсивности напряжений от деформаций в численных экспериментах на простое циклическое нагружение растяжением-сжатием макрообразца меди (а) и растяжением-сжатием образца поликристалла латуни (б), максимальная интенсивность деформаций составляет 3%

Модель была применена к описанию сложного циклического деформирования с различной величиной непропорциональности (несинфазности изменения компонент тензора деформации), программа нагружения описана в программе деформирования (1.1). Все исследуемые траектории в двумерном пространстве деформаций расположены внутри окружности предписанного радиуса амплитуды интенсивности деформаций, имея с ней, по меньшей мере, две точки соприкосновения. Результаты расчетов для нагружения по закону (1.1) макрообразцов меди и латуни приведены на рис.4.9.



(a)



(б)

Рисунок 4.9 Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций при $P_m=1$, максимальная амплитуда деформаций 1,5%, (а) – медь, $\phi = 45^\circ$, (б) – латунь, $\phi = 60^\circ$

В ходе численного эксперимента по заданному кинематическому воздействию определялись максимальные интенсивности напряжений и величина ДЦУ (после выхода на стационарные значения кривой напряжения – накопленные деформации) (Таблица 4.2).

Таблица 4.2. Величина дополнительного циклического упрочнения в зависимости от величины угла ϕ и коэффициента пропорциональности P_m образцов из меди и латуни

| Материал | P_m | ϕ , град | Δ_{ad} , % | ϕ , град | Δ_{ad} , % |
|----------|-------|---------------|-------------------|---------------|-------------------|
| Медь | 1 | 15 | 5,1 | 60 | 6,4 |
| | | 30 | 5,2 | 75 | 7,0 |
| | | 45 | 6,1 | 90 | 7,1 |
| Латунь | 1 | 15 | 11,1 | 60 | 13,1 |
| | | 30 | 12,3 | 75 | 16,1 |
| | | 45 | 12,8 | 90 | 23,1 |

| Материал | φ , град | P_m | Δ_{ad} , % | P_m | Δ_{ad} , % |
|----------|------------------|-------|-------------------|-------|-------------------|
| Медь | 33 | 0,25 | 1,1 | 0,75 | 4,1 |
| | | 0,5 | 1,2 | 1 | 5,2 |
| Латунь | 33 | 0,25 | 6,1 | 0,75 | 11,1 |
| | | 0,5 | 10,3 | 1 | 12,3 |

Анализ полученных численных экспериментов позволил установить характер зависимости величины дополнительного упрочнения от сложности нагружения, графически представленные на Рис.4.10.

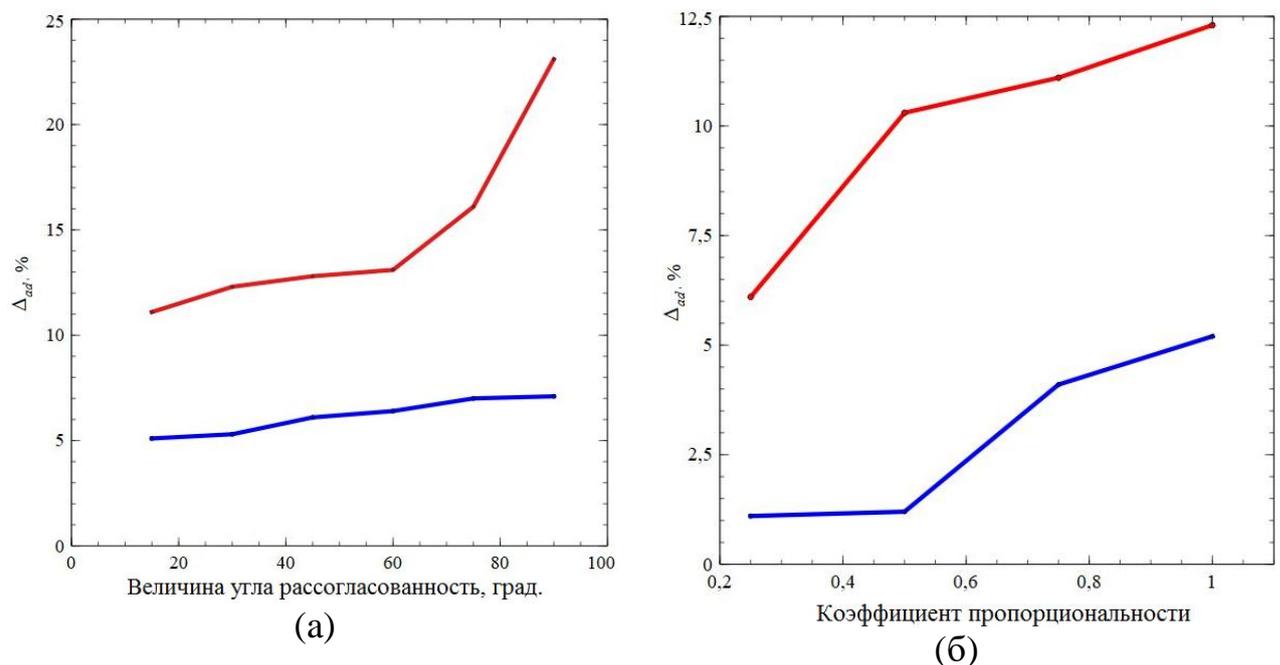


Рисунок 4.10 Зависимость величины дополнительного упрочнения от степени непропорциональности циклического нагружения для отклонения по фазе (а) и изменения отношения амплитуд деформаций сдвига и растяжения (б) (латунь – график красным цветом, медь – синим)

Для анализа зависимости величины дополнительного циклического упрочнения Δ_{ad} от ориентации в пространстве деформаций начального участка траектории деформации были проведены численные эксперименты по замкнутым траекториям в виде квадрата (рис.4.11, схемы (а) и (б)). Для поликристаллических образцов из латуни величина Δ_{ad} составила от 8,2% (траектория (б)) до 8,6% (траектория (а)) в зависимости от пути выхода на

замкнутый цикл. Необходимо отметить, что разница в величине Δ_{ad} возникла по причине различий в эволюции плотностей дислокаций на начальной стадии деформирования: при одновременном растяжении и сдвиге произошло более активное повышение плотностей дислокаций и барьеров.

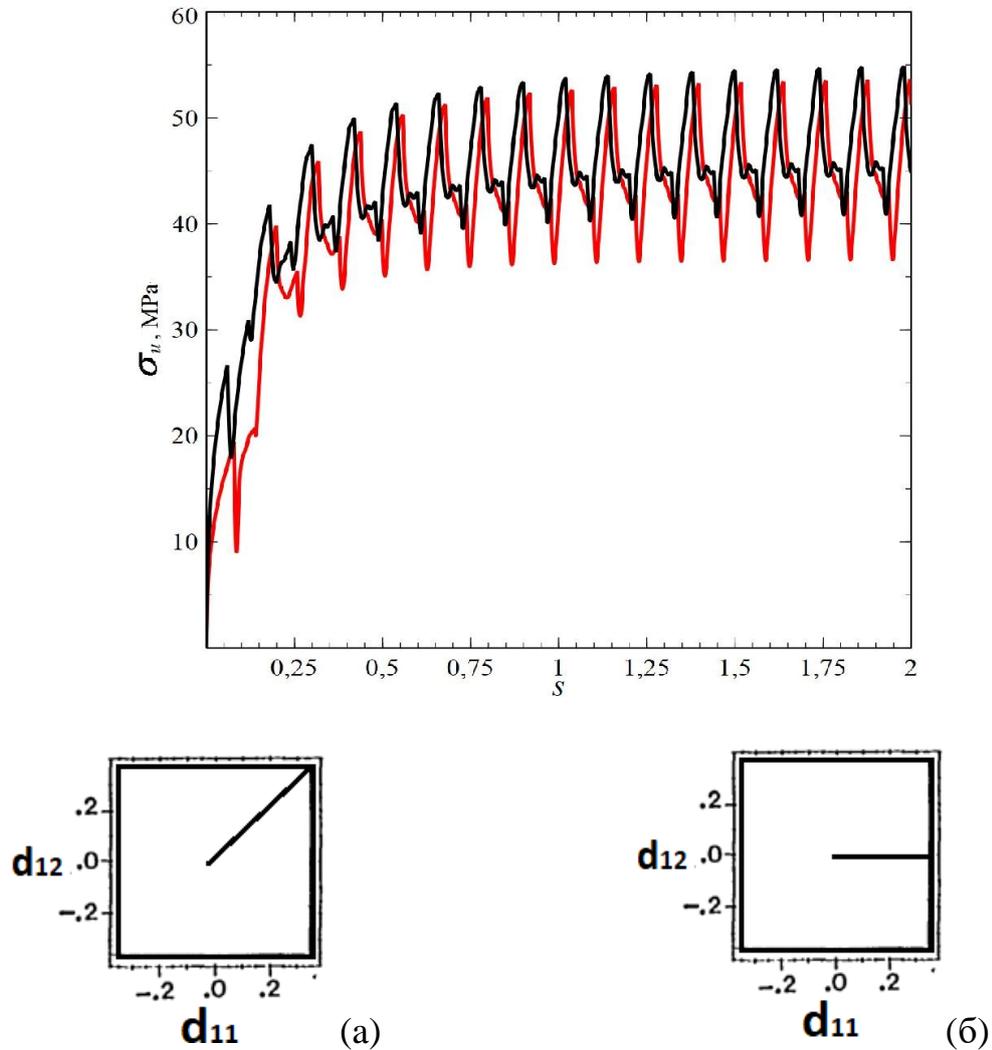


Рисунок 4.11 Зависимость максимальных напряжений от интенсивности накопленных деформаций в экспериментах на сложное циклической нагружение макрообразца из поликристаллической латуни по двум траекториям ((а) – чёрный, (б) – красный)

Полученные зависимости качественно соответствуют результатам, наблюдаемым в натуральных экспериментах. Предложенная модель позволяет провести анализ эволюции плотностей дислокаций и барьеров, образованных на расщеплённых дислокациях. Необходимо отметить, что при

деформировании латунного образца, имеющего относительно низкое значение ЭДУ, наблюдается более интенсивное образование барьеров на расщеплённых дислокациях, приводящее к большему (по сравнению с медью) упрочнению (Рис.4.12).

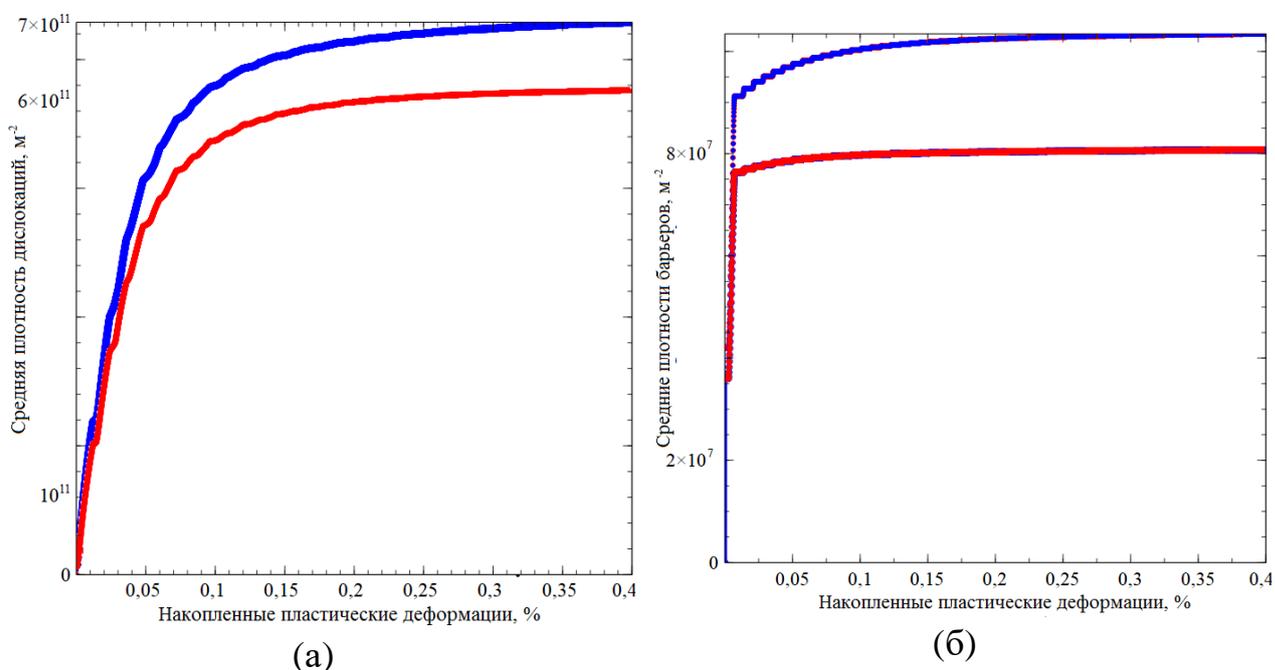


Рисунок 4.12 Зависимость средней плотности дислокаций (а) и средней плотности барьеров (б) при циклическом непропорциональном нагружении образцов из меди (красный) и латуни (синий)

Стоит отметить, что разработанная трехуровневая модель позволяет оценить состояние микроструктуры любого кристаллита в любой момент времени, что даёт возможность анализировать предсказываемые плотности дислокаций и барьеров на различных системах скольжения. Таким образом, данная модель может выступать в роли виртуальной экспериментальной системы, позволяющей анализировать как НДС представительного объема материала и отдельных зёрен, так и плотности дефектов в них (рис. 4.13, 4.14).

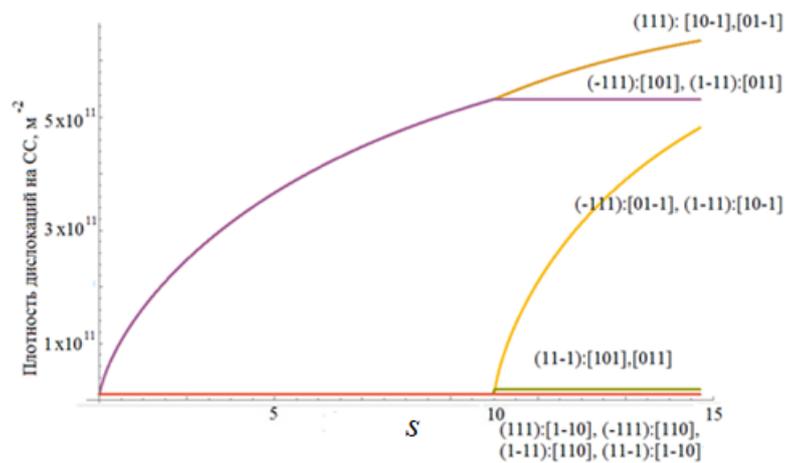


Рисунок 4.13 Зависимость плотности дислокаций ρ по различным СС от интенсивности накопленных деформаций при растяжении до 10 % и последующем сдвиге на 7 % (приведены плотности дислокаций в случайно выбранном кристаллите с ориентировкой кристаллографической системы координат по отношению к лабораторной системе координат (ЛСК) в углах Эйлера: $\alpha = 31^\circ$, $\beta = 11^\circ$, $\gamma = 19^\circ$)

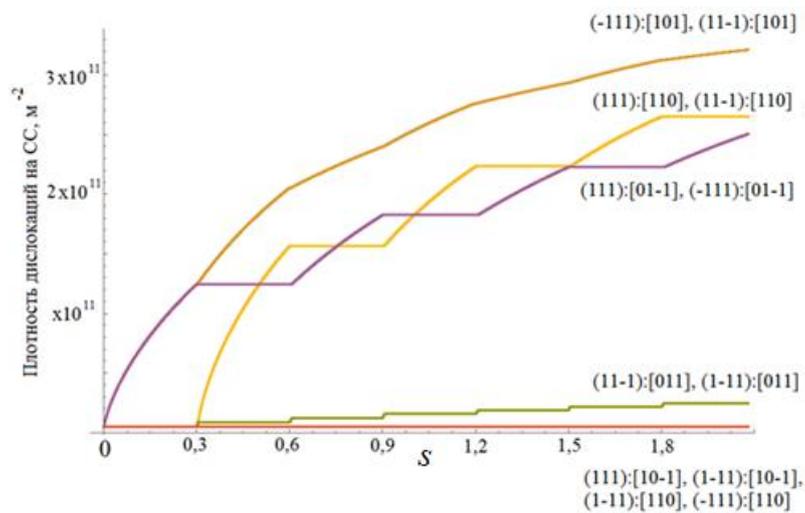


Рисунок 4.14 Зависимость плотности дислокаций ρ по СС от интенсивности накопленных деформаций при последовательном растяжении и сдвиге (медь, ЭДУ 75 МДж м⁻²)

Суммируя вышеизложенное, можно заключить, что численные эксперименты показали, что при одинаковых по сложности программах нагружения дополнительное упрочнение более интенсивно происходит в материале с низкой энергией дефекта упаковки – латуни. Кривая амплитуда интенсивности напряжений – интенсивность накопленных деформаций

выходит на стационарное значение в среднем при 45% накопленных деформаций. Плотности дислокаций при этом увеличиваются на 4-5 порядков в зависимости от сложности нагружения; для образца из латуни существенный вклад в повышение напряжения течения вносит упрочнение за счёт образования барьеров на расщеплённых дислокациях. Качественное соответствие результатов расчета экспериментальным данным, приведенным в работах [88], позволяет констатировать принципиальную применимость разработанной модели для описания процессов циклического, в том числе сложного, нагружения материалов с различной величиной ЭДУ.

Заключение

В настоящей работе проведен аналитический обзор актуальных на данный момент экспериментальных исследований по сложному циклическому деформированию различных металлов и сплавов. Обзор теоретических исследований по построению моделей для описания процессов сложного циклического деформирования показал необходимость включения в модели описания состояния микроструктуры в ходе пластического деформирования на уровне дислокаций и барьеров дислокационной природы. Для описания сложного циклического деформирования была проведена модификация существующей двухуровневой конститутивной модели путём добавления третьего структурно-масштабного уровня, на котором производится прямое описание эволюции микроструктуры на указанном уровне. Введённый уровень является масштабно соответствующем мезоуровню-1, на мезоуровне-1 производится описание отклика представительного объёма кристаллита как механической системы; на мезоуровне-2 изменение состояния кристаллитов осуществляется в терминах плотностей дефектов (дислокаций и барьеров Ломера – Коттрелла и Хирта). В качестве прямой связи с мезоуровня-1 передаются величины касательных напряжений на системах скольжения, обратная связь осуществляется передачей на мезоуровень-1 скоростей сдвигов на системах скольжения. На добавленном мезоуровне-2 явно введены плотности дислокаций на системах скольжения и описаны процессы образования и аннигиляции дислокаций. Также на мезоуровне-2 введены плотности барьеров на расщеплённых дислокациях, описаны реакции по образованию данных барьеров, предложен алгоритм определения напряжений сопротивления движению дислокаций от барьеров. Следует обратить внимание, что в модели напрямую учитывается величина энергии дефекта упаковки материала: данная величина определяет скорость образования барьеров на расщеплённых дислокациях. Отдельной решённой

задачей является построение закона упрочнения, явным образом учитывающего плотности дислокаций и барьеров на системах скольжения.

Создан алгоритм для численных вычислений с использованием разработанной модели и программа его реализации на ЭВМ. Разработаны процедуры определения параметров закона упрочнения модели и идентификации модели в целом, основанные на решении задачи минимизации нормы разницы теоретических и экспериментальных результатов методом Нелдера – Мида. Применение модели с определёнными параметрами на иных (нежели при идентификации) процессах деформирования показало удовлетворительное соответствие результатов расчета данным натуральных экспериментов.

Применение разработанной модели для описания отклика различных материалов (в первую очередь – отличающихся по величине ЭДУ) с ГЦК-решёткой показало принципиальную возможность исследовать отклик рассматриваемого класса металлов и сплавов в условиях различных по сложности циклических деформаций. Таким образом, было показано, что разработанная трёхуровневая модель может быть использована для описания деформирования ГЦК-материалов с различной величиной ЭДУ по сложным траекториям деформации, а также применима для определения состояния внутренней дефектной структуры материалов в процессах деформирования.

Список литературы

1. Аннин Б.Д., Жигалкин В.М. Поведение материалов в условиях сложного нагружения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999. – 342 с.
2. Бондарь В.С. Неупругость. Варианты теории. – М.: Физматлит, 2004. – 144 с.
3. Бондарь В.С., Абашев Д.Р., Петров В.К. Пластичность материалов при пропорциональных и непропорциональных циклических нагружениях // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2017. – №3. – С. 53-74. DOI: 10.15593/perm.mech/2017.3.04
4. Бондарь В.С., Абашев Д.Р. Некоторые особенности процессов монотонных и циклических нагружений. Эксперимент и моделирование // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2019. – №2. – С. 25-34. DOI: 10.15593/perm.mech/2019.2.03
5. Васин Р.А. Некоторые вопросы связи напряжений и деформаций при сложном нагружении // В сб. Упругость и неупругость. Вып.1. – М.: МГУ, 1971. – С.59–126.
6. Васин Р.А. Свойства функционалов пластичности у металлов, определяемые в экспериментах на двузвенных траекториях деформации // В сб.: Упругость и неупругость. – М.: МГУ, 1987. – С.115–127.
7. Васин Р.А. Определяющие соотношения теории пластичности // Итоги науки и техники. Сер. Механика деформируемого твердого тела. ВИНТИ. – 1990. –Т. 21. – С.3–75.
8. Грибов Д.С., Трусов П.В. Дислокационно-ориентированная трехуровневая модель для описания деформирования поликристаллов: структура, алгоритм реализации, примеры применения для исследования сложного циклического нагружения // Физическая мезомеханика. – 2022. – Т.25, №4. – С.94-105. DOI: 10.55652/1683-805X_2022_25_4_94
9. Грибов Д.С., Трусов П.В. Трехуровневая упруговязкопластическая модель: анализ влияния величины энергии дефекта упаковки на отклик материалов при сложном нагружении // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2020. – №4. – С.60-73.
10. Гультяев В.И. Сложное нагружение и разгружение конструкционных материалов типа стали Ст–45 в условиях нормальных температур // Машиностроение: сетевой электронный научный журнал. – 2015. – Т.3, №3. – С.47–49.

11. Зубчанинов В.Г. Основы теории упругости и пластичности. – М.: Высшая школа, 1990. – 368 с.
12. Зубчанинов В.Г. Устойчивость и пластичность. В 2 т. Т.2. Пластичность. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2008. – 336 с.
13. Ильюшин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. – М.: АН СССР, 1963. – 272 с.
14. Качанов Л.М. Основы теории пластичности. – М.: Наука, 1969. – 420 с.
15. Коларов Д., Балтов А., Бончева Н. Механика пластических сред. – М.: Мир, 1979. – 302 стр.
16. Ленский В.С. Экспериментальная проверка законов изотропии и запаздывания при сложном нагружении // Изв. АН СССР. ОТН. –1958. – С. 15-24.
17. Маркин А.А., Соколова М.Ю., Христич Д.В. Процессы упругопластического конечного деформирования. – Тула: Изд-во ТулГУ, 2011. – 374 с.
18. Можен Ж. Механика электромагнитных сплошных сред. – М.: Мир, 1991. – 560 с.
19. Новиков И.И. Дефекты кристаллического строения металлов. – М.: Металлургия, 1983. – 232 с.
20. Новожилов В.В., Кадашевич Ю.И. Микронапряжения в конструкционных материалах. – Л.: Машиностроение, 1990. – 223 с.
21. Окишев К.Ю. Кристаллохимия и дефекты кристаллического строения. – Челябинск: Издательство ЮУрГУ, 2007 – 97 с.
22. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах. – М.: Высшая школа, 1983. – 144 с.
23. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат.лит, 1988. – 712 с.
24. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. – М.: Мир, 1975. – 592 с.
25. Труссов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.1. Жесткопластические и упругопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011а. –№.1. – С.5-45.
26. Труссов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.2. Вязкопластические и упруговязкопластические модели // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011б. – №.2. – С.101-131.
27. Труссов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.3.

- Теории упрочнения, градиентные теории // Вестник ПГТУ. Механика. – 2011в. – №.3. – С.146–197.
28. Трусов П.В., Волегов П.С., Швейкин А.И.; Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т.15, №1 – С.33-56.
29. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к оценке справедливости постулата изотропии Ильюшина в случае больших градиентов перемещений // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2015. – Т. 18, №1. –С. 23-37.
30. Трусов П.В., Грибов Д.С. Трёхуровневая модель, основанная на физических теориях пластичности: формулировка, алгоритмы реализации, результаты применения для исследования циклического нагружения // Вычислительная механика сплошных сред. – 2022. – Т. 15, № 3. – С. 274-288. DOI: 10.7242/1999-6691/2022.15.3.21
31. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2011а. – Т.14, №4. – С. 17-28. DOI: 10.24411/1683-805X-2011-00029
32. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011б. – Т.14, №5. – С. 5-30. DOI: 10.24411/1683-805X-2011-00021
33. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2011в. – 419 с.
34. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. — Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. — 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TRV
35. Фридель Ж. Дислокации. – М.: Мир, 1967. – 644 с.
36. Хилл Р. Математическая теория пластичности. – М.: Гостехиздат, 1956. – 407 с.
37. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. – М.: Мир, 1975. – 534 с.
38. Хирт Дж., Лотэ И. Теория дислокаций. – М.: – Атомиздат, 1972 – 599 с.
39. Штремель М.А. Прочность сплавов. Ч. I. Дефекты решетки. – М.: Изд. МИСИС, 1999. – 384 с.
40. Alleman C. et al. Distribution-enhanced homogenization framework and model for heterogeneous elasto-plastic problems / Alleman C., Luscher D. J., Bronkhorst C., Ghosh S. // J. Mech. Phys. Solids. –2015. – Vol. 85. – P. 176-202. DOI: 10.1016/j.jmps. 2015. 09.012.

41. Aubin V., Quaegebeur P., Degallaix S. Cyclic behaviour of a duplex stainless steel under multiaxial loading: experiments and modelling // European Structural Integrity Society. – 2003. – Vol.31. – P.401-422. DOI: 10.1016/S1566-1369(03)80022-5
42. Andar M.O. et al. Elastic-plastic and inelastic characteristics of high strength steel sheets under biaxial loading and unloading / Andar M.O., Kuwabara T., Yonemura S., Uenishi A. // ISIJ Int. – 2010. – V. 50. – P. 613-619. DOI: 10.2355/isijinternational.50.613
43. Aravas N. Finite elastoplastic transformations of transversely isotropic metals // Int. J. Solids Structures. – 1992. – Vol. 29, N 17. – P. 2137-2157. DOI: 10.1016/0020-7683(92) 90062-X.
44. Aravas N. Finite-strain anisotropic plasticity and the plastic spin // Modelling Simul. Mater. Sci.Eng. – 1994. – Vol. 2. – P. 483-504. DOI: 10.1088/0965-0393/2/3A /005.
45. Ardeljan M., Beyerlein I. J., Knezevic M. A dislocation density based crystal plasticity finite elementmodel: Application to a two-phase polycrystalline HCP /BCC composites // J. Mech. And Phys. Solids. — 2014. – Vol. 66. – P. 16-31. – DOI: 10.1016/ j.jmps. 2014.01.006
46. Balasubramanian S., Anand L. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures // J. Mech. and Phys. Solids. – 2002. – V. 50. – Pp. 101-126. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00022-9
47. Balokhonov R.R., Romanova V.A., Schmauder S. Finite-element and finite-difference simulations of the mechanical behavior of austenitic steels at different strain rates and temperatures // Mechanics of Materials. – 2009. – Vol.41, No.12. – P.1277-1287. DOI: 10.1016/j.mechmat.2009.08.005.
48. Benallal A., Marquis D. Constitutive equations for nonproportional cyclic elastoviscoplasticity // J. Engineering Materials and Technology. – 1987. – Vol.109, No.4. – P.326-336, DOI: 10.1115/1.3225985
49. Benallal A., Marquis D. Effects of non-proportional loadings in cyclic elasto-viscoplasticity: experimental, theoretical and numerical aspects // Engineering Computations. – 1988. – Vol.5, Is. 3. – P.241-247. DOI: 10.1108/eb023742
50. Benallal A., Le Gallo P., Marquis D. An experimental investigation of cyclic hardening of 316 stainless steel and of 2024 aluminium alloy under multiaxial loadings // Nuclear Engineering and Design. – 1989. – Vol.114. – P.345-353. DOI: 10.1016/0029-5493(89)90112-X
51. Beradai Ch., Berveili M., Lipinski P. Plasticity of metallic polycrystals under complex loading paths // Int. J. Plasticity. – 1987. – Vol. 3. – P. 143-162. DOI: 10.1016/0749-6419(87)90004-0

52. Bergström Y. A dislocation model for the stress-strain behaviour of polycrystalline α -Fe with special emphasis on the variation of the densities of mobile and immobile dislocations // *Materials Science and Engineering*. – 1970. – Vol. 5. – P. 193-200. DOI:10.1016/0025-5416(70)90081-9
53. Berveiller M., Zaoui A. Modeling of the plastic behavior of inhomogeneous media // *ASME. J. Eng. Mater. Technol.* – 1984. – Vol.106, No.4. – P.295-298. DOI: 10.1115/1.3225719
54. Beyerlein I.J., McCabe R.J., Tome C.N. Effect of microstructure on the nucleation of deformation twins in polycrystalline high-purity magnesium: A multi-scale modeling study // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2011. – Vol. 59. – P. 988-1003. DOI: 10.1016/j.jmps.2011.02.007.
55. Bishop J.F., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face - centered metal // *Phil. Mag. Ser.7*. – 1951. –V. 42, N. 334. – P. 1298-1307.
56. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses // *Phil. Mag. Ser.7*. – 1951. – V. 42, N. 327. – P. 414-427.
57. Bocher L. et al. Mechanical and microstructural investigations of an austenitic stainless steel under non-proportional loadings in tension–torsion–internal and external pressure / Bocher L., Delobelle P., Robinet P., Feaugas X. // *Int. J. Plasticity*. – Vol. 17 . – 2001. – P.1491-1530. DOI: 10.1016/S0749-6419(01)00013-4
58. Borodachenkova M. et al. Numerical simulation of the mechanical response during strain path change: application to Zn alloys / Borodachenkova M., Wen W., Barlat F., Pereira A., Grácio // *Proc. Engineering*. — 2014. — Vol. 81. — P. 1300-1305. DOI:10.1016/j.proeng.2014.10.147.
59. Borodii M.V. et al. An experimental study of ratcheting effect under multiaxial proportional loading / Borodii M.V., Stryzhalo V.O., Kucher M.K., Danyl'chuk E.L., Adamchuk M.P. // *Strength of Materials*.–2014. –V. 46. No. 1. – P. 97-104. DOI: 10.1007/s11223-014-9520-3
60. Chaboche J.L. A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories // *Int. J. Plasticity*. – 2008. – Vol. 24. – P. 1642-1693. DOI: 10.1016/j.ijplas.2008.03.009
61. Chaboche J.L. Constitutive equations for cyclic plasticity and cyclic viscoplasticity // *Int. J. Plasticity*. – 1989. – Vol. 5. – Iss.3. – P.247-302. DOI: 10.1016/0749-6419(89)90015-6
62. Cho J., Molinari J.-F., Ancaux G. Mobility law of dislocations with several character angles and temperatures in FCC aluminum // *Int. J. Plasticity*. – 2017. – Vol. 90. – P. 66-75. DOI:10.1016/j.ijplas.2016.12.004

63. Dafalias Y.F. On multiple spins and texture development. Case study: kinematic and orthotropic hardening // *Acta Mechanica*. – 1993. – Vol. 100. – P. 171-194. DOI: 10.1007/BF01174788.
64. Dafalias Y.F. Plastic spin: necessity or redundancy? // *Int. J. Plasticity*. – 1998. – Vol. 14, N 9. – P. 909-931. DOI: 10.1016/S0749-6419(98) 00036-9.
65. Devincere B., Hoc T., Kubin L. Dislocation mean free paths and strain hardening of crystals // *Science, New Series*. – 2008. – Vol.320. – P.1745-1748. DOI: 10.1126/science.1156101
66. Dingli J.P., Abdul-Latif A., Saanouni K. Predictions of the complex cyclic behavior of polycrystals using a self-consistent modeling // *Int. J. Plasticity*. – 2000. – Vol.16. – P.411-437. DOI: 10.1016/S0749-6419(99)00060-1
67. Doong S.-H., D. F. Socie, I. M. Robertson Dislocation Substructures and Nonproportional Hardening // *J. Eng. Mater. Technol.* – 1990. – Vol.112(4) . – P. 456-464. doi:10.1115/1.2903357
68. Doquet V., Pineau A. Extra hardening due to cyclic non-proportional loading of an austenitic stainless steel // *Scripta Metallurgica et Materialia*. – 1990. – Vol. 24. – Iss. 3. – P.433-438. DOI: 10.1016/0956-716X(90)90178-J
69. Doquet V. Twinning and multiaxial cyclic plasticity of a low stacking-fault-energy f.c.c. alloy // *Acta Metallurgica et Materialia*. – 1993. – Vol. 41, Is. 8. – P. 2451-2459. DOI: 10.1016/0956-7151(93)90325-M
70. Dupuy L., Fivel M.C. A study of dislocation junctions in FCC metals by an orientation dependent line tension model // *Acta Materialia*. – 2002. – Vol.50. – P.4873-4885. DOI: 10.1016/s1359-6454(02)00356-7
71. Feltner C.E., Laird C. Cyclic stress-strain response of f.c.c. metals and alloys–I. Phenomenological experiments // *Acta metallurgica*. – 1967a. – Vol.15. – P.1621-1632. DOI: 10.1016/0001-6160(67)90137-X
72. Feltner C.E., Laird C. Cyclic stress-strain response of F.C.C. metals and alloys–II Dislocation structures and mechanisms // *Acta metallurgica*. – 1967b. – Vol.15. – P.1633-1653. DOI: 10.1016/0001-6160(67)90138-1
73. Franciosi P., Berveiller M., Zaoui A. Latent hardening in copper and aluminium single crystals // *Acta Metall.* –1980, – V. 28, N. 3. – P. 273-283. DOI: 10.1016/0001-6160(80)90162-5
74. Franciosi P. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals // *Acta Metall.* –1985. – V. 33. – P. 1601-1612. DOI: 10.1016/0001-6160(85)90154-3
75. Frederick C.O., Armstrong P. A Mathematical representation of the multiaxial bausinger effect // *Materials at High Temperatures*. – 2007. – Vol.24. – No1. – P.1-26. DOI: 10.3184/096034007X207589

76. Gates N.R., Fatemi A. A simplified cyclic plasticity model for calculating stress-strain response under multiaxial non-proportional loadings // *Eur. J. Mechanics A/Solids*. – 2016. – Vol.59. – P.344-355. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2016.05.001
77. Gérard C. et al. Hardening description for FCC materials under complex loading paths / Gérard C., Bacroix B., Bornert M., Cailletaud G., Crépin J., Leclercq S. // *Comput. Mater. Sci.*–2009. – V. 45. – P. 751-755. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.08.027
78. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys // *Int. J. Plasticity*. – 2013. – V. 42. – P. 194-212. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.10.010
79. Germain P., Nguyen Q., Suquet P. Continuum thermodynamics // *J. Appl. Mech.* – 1983. – Vol.50. – P.1010–1020. DOI: 10.1115/1.3167184.
80. Gribov D.S., Popov F.S., Trusov P.V. Three-level elastic-viscoplastic model: The influence of the evolution of the dislocation substructure on the behavior of polycrystals under complex cyclic loading // *AIP Conference Proceedings*. –2020. –Vol.2310, Is.1. –020114 (5 p.).
81. Habraken A.M. Modelling the plastic anisotropy of metals // *Arch. Comput. Meth. Engng.* –2004. – Vol. 11. – N 1. – P. 3-96. DOI: 10.1007/BF02736210.
82. Halphen B., Nguyen Q. Sur les matériaux standard généralisés // *J. Mécanique*. – 1975. – Vol.14. – P.39–63.
83. Hama T., Takuda H. Crystal-plasticity finite-element analysis of inelastic behavior during unloading in a magnesium alloy sheet // *Int. J. Plasticity*. – 2011. – Vol.27, No.7. – P.1072-1092. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.11.004
84. Hamelin C.J., Diak B.J., Pilkey A.K. Multiscale modelling of the induced plastic anisotropy in bcc metals // *Int. J. Plasticity*. – 2011. – Vol.27, No.8. – P. 1185-1202. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.01.003
85. Haupt P., Kamlah M. Representation of cyclic hardening and softening properties using continuous variables // *Int. J. Plasticity*. – 1995. – Vol.11, Iss.3. – P.267-291. DOI: 10.1016/0749-6419(94)00049-2
86. Hull D., Bacon D.J. Introduction to Dislocations Five Edition // ed. Butterworth-Heinemann. – 2011. – 623 p.
87. Iadicola M.A. et al. Crystal plasticity analysis of constitutive behavior of 5754 aluminum sheet deformed along bi-linear strain paths / Iadicola M.A., Hu L., Rollett A.D., Foecke T. // *Int. J. Solids Struct.* – 2012. – Vol. 49. – P. 3507-3516. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2012.03.015/
88. Jiang Y., Zhang J. Benchmark experiments and characteristic cyclic plasticity deformation // *Int. J. Plasticity*. – 2008. – Vol. 24. – P.1481-1515. DOI: 10.1016/j.ijplas.2007.10.003.

89. Khan A.S., Liu J. A deformation mechanism based crystal plasticity model of ultrafine grained/nanocrystalline FCC polycrystals // *Int. J. Plast.* . – 2016. – Vol. 86. – P. 56-69. DOI:10.1016/j.ijplas.2016.08.001
90. Kitayama K. et al. A crystallographic dislocation model for describing hardening of polycrystals during strain path changes. Application to low carbon steels / Kitayama K., Tomé C. N., Rauch E. F., Gracio J. J., Barlat F. // *Int. J. Plasticity.* – 2013. – Vol. 46. – P. 54-69. DOI: 10.1016/j.ijplas.2012.09.004.
91. Knezevic M. et al. A polycrystal plasticity model for predicting mechanical response and texture evolution during strain-path changes: Application to beryllium / Knezevic M., Beyerlein I. J., Brown D. W., Sisneros T. A., Tomé C. N. // *Int. J. Plasticity.* – 2013. – Vol. 49. – P. 185-198. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.03.008
92. Knezevic M., Beyerlein I. Multiscale modeling of microstructure-property relationships of polycrystalline metals during thermo-mechanical deformation // *Adv. Eng. Mater.* – 2018. – Vol.20. – 1700956 (19 p.). DOI: 10.1002/adem.201700956
93. Krempl E., Lu H. Comparison of the stress responses of an aluminum alloy tube to proportional and alternate axial and shear strain paths at room temperature // *Mech. Mater.* – 1983. – Vol. 2. – P. 183-192. [https://doi.org/10.1016/0167-6636\(83\)90013-3](https://doi.org/10.1016/0167-6636(83)90013-3)
94. Kocks U.F. Constitutive behavior based on crystal plasticity. – In: *Unified constitutive equations for creep and plasticity*, ed. A.K. Miller. – Springer, 1987. – P. 1-88. DOI: 10.1007/978-94-009-3439-9_1
95. Kröner E. Zur plastischen verformung des vielkristalls // *Acta Metallurgica.* – 1961. – Vol.9. – P.155-191. DOI:10.1016/0001-6160(61)90060-8
96. Laird C., Charsley P., Mughrabi H. Low energy dislocation structures produced by cyclic deformation // *Materials Science and Engineering.* – 1986. – Vol.81. – P.433-450. DOI: 10.1016/0025-5416(86)90281-8
97. Lamba H.S.; Sidebottom O.M. Cyclic plasticity for nonproportional paths: Part 1—Cyclic hardening, erasure of memory, and subsequent strain hardening experiments // *J. Eng. Mater. Technol.* – 1978. – Vol.100, Is.1. – P.96-103. DOI: 10.1115/1.3443456.
98. Leffers T., Ray R. K. The brass-type texture and its deviation from the copper-type texture // *Prog. Mater Sci.* — 2009. — Vol. 54. — P. 351—396. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2008.09.002.
99. Li P. et al. Fundamental factors on formation mechanism of dislocation arrangements in cyclically deformed FCC single crystals / Li P., Li S.X., Wang Z.G., Zhang Z.F. // *Progress in Materials Science.* – 2011. V. 56. – P. 328–377. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2010.12.001

100. Lin P., El-Azab A. Implementation of annihilation and junction reactions in vector density-based continuum dislocation dynamics // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2020. – Vol. 28. – 045003. DOI:10.1088/1361-651X/ab7d90
101. Madec R., Devincre B., Kubin L.P. Simulation of dislocation patterns in multislip. *Scripta Mater.* – 2002. – Vol. 47. – P. 689-695. DOI:10.1016/S1359-6462(02)00185-9
102. Masima M., Sachs G.O. Mechanische Eigenschaften von Messingkristallen // *Z. Physik.* – 1928. – V. 50. – P. 161-186.
103. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques // *Int. J. Solids Structures.* – 1973. – Vol. 9. – P. 725-740. DOI: 10.1016/0020-7683(73) 90120-0.
104. Maugin G.A. Continuum mechanics through the twentieth century. Ch. 13. Generalized continuum mechanics: various paths // *Solid Mechanics and Its Applications* 196. – Springer Science+ Business Media Dordrecht, 2013. – P. 223-241. DOI: 10.1007/978-94-007-6353-1_13
105. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893-2013) // *Mechanics Research Communications.* – 2015. – Vol.69. – P.79–86. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00
106. McDowell D.L. A nonlinear kinematic hardening theory for cyclic thermoplasticity and thermoviscoplasticity // *Int. J. Plasticity.* – 1992. – Vol. 8, Iss.6. – P.695-728. DOI: 10.1016/0749-6419(92)90024-7
107. McDowell D. L. Internal state variable theory // *Handbook of Materials Modeling* / Ed. S. Yip. – Springer, 2005. – P. 1151-1169. DOI: 10.1007/978-1-4020-3286-8_58.
108. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity // *Int. J. Plasticity.* – 2010. – Vol.26. – P. 1280-1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010. 02.008
109. Orowan E. Problems of plastic gliding // *Proc. Phys. Soc.* – 1940. – vol. 52. – P. 8-22. DOI:10.1088/0959-5309/52/1/303
110. Peeters B. et al. Work hardening-softening behavior of b.c.c polycrystals during changing strain paths: II. TEM observations of dislocation sheets in an IF steel during two—stage strain paths and their representation in terms of dislocation densities / Peeters B., Bacroix B., Teodosiu C., Van Houtte P., Aernoudt E // *Acta Mater.* – 2001a. – Vol. 49. – P. 1621-1632. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00067-2.
111. Peeters B. et al. Teilor ambiguity in b.c.c polycrystals: a nonproblem if substructural anisotropy is considered / Peeters B., Seefeldt M., Van Houtte P., Aernoudt E. // *Scripta Mater.* – 2001b. – Vol. 45. – P. 1349-1356. DOI: 10.1016/S1359-6462(01)01168-X

112. Povall T. M., McBride A. T., Reddy B. D. Finite element simulation of large-strain single-crystal viscoplasticity: An investigation of various hardening relations // *Computational Materials Science*. – 2014. – Vol. 81. – P. 386-396. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.08.043.
113. Rice J.R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity // *J. Mech. Phys. Solids*. – 1971. – Vol. 19. – P. 433-455. DOI:10.1016/0022-5096(71)90010-X.
114. Roters F. et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. // *Acta Materialia*. – 2010. – Vol.58. – P.1152-1211, DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058.
115. Roters F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p.
116. Sachs G. Zur Ableitung einer Fließbedingung // *Z. Verein Deut. Ing.* – 1928. –N.72. – Pp. 734-736.
117. Stainier L., Cuitin A. M., Ortiz M. A micromechanical model of hardening, rate sensitivity and thermal softening in bcc single crystals // *J. Mech. Phys. Solids*. – 2002. – Vol. 50. – P. 1511-1545. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00114-4.
118. Shang D.G., Wang D.J., Yao W.X. A simple approach to the description of multiaxial cyclic stress – strain relationship // *Int. J. Fatigue*. – 2000. – Vol.22. – P.251-256. DOI: 10.1016/S0142-1123(99)00117-6
119. Shveykin A.I., Trusov P.V., Sharifullina E.R. Statistical crystal plasticity model advanced for grain boundary sliding description // *Crystals*. – 2020 . – V. 10. – Iss. 9. – P. 1-18. – DOI:10.3390/cryst10090822
120. Shveykin A., Romanov K., Trusov P. Some issues with statistical crystal plasticity models: Description of the effects triggered in FCC crystals by loading with strain-path changes // *Materials*. – 2022. – Vol.15. – 6586 (21 p.). DOI: 10.3390/ma15196586
121. Sudmanns M. et al. Data-driven exploration and continuum modeling of dislocation networks / Sudmanns M., Bach J., Weygand D., Schulz K. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* – 2020. – Vol. 28. – 065001. DOI:10.1088/1361-651X/ab97ef
122. Tanaka E., Murakami S., Ōoka M. Effects of plastic strain amplitudes on non-proportional cyclic plasticity – *Acta Mechanica*. – 1985. – Vol. 57. – P.167-182. DOI: 10.1007/BF01176916
123. Taylor G.I., Elam C.F. The distortion of an aluminium crystal during a tensile test // *Proc. Roy. Soc. (London)*. – 1923. – Ser. A 102. – P. 643-647.
124. Taylor G.I. Plastic strain in metals // *J. Inst. Metals*. – 1938. –V. 62. – P. 307-324.

125. Tokuda M., Kratochvil J., Ohashi Y. On mechanism of induced plastic anisotropy of polycrystalline metals // Bull. JSME. – 1982. – Vol. 25, N 208. – P. 1491-1497. DOI: 10.1299/jsme1958.25.1491
126. Trampczynski W. The experimental verification of the evolution of kinematic and isotropic hardening in cyclic plasticity // J. Mechanics and Physics of Solids. – 1988. – Vol. 36, Is. 4. – P.417-441. DOI: 10.1016/0022-5096(88)90026-9
127. Trusov P.V., Gribov D.S. The three-level elastoviscoplastic model and its application to describing complex cyclic loading of materials with different stacking fault energies // Materials. – 2022. – Vol. 15. – 760. DOI:10.3390/ma15030760
128. Valanis K.C. A theory of viscoplasticity without a yield surface. Part I: General theory // Arch. Mech. Stosow. – 1971a. – Vol.23. – P.517-533.
129. Valanis K.C. A theory of viscoplasticity without a yield surface. Part II: Application to the mechanical behavior of metals // Arch. Mech. Stosow. – 1971b. – Vol.23. – P.535-551.
130. Verdieryk M., Fivelz M., Gromax I. Mesoscopic scale simulation of dislocation dynamics in FCC metals: Principles and applications // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 1998. – Vol. 6. – P. 755–770. DOI: 10.1088/0965-0393/6/6/007
131. Volegov P.S., Trusov P.V., Gribov D.S. Investigation of the features of polycrystals complex loading using a two-level crystal plasticity theory // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. –2015. –Vol.71 . – № 012071 (6 p.).
132. Wagner F. et al. Comparison of simulated and experimental deformation textures for BCC metals / Wagner F., Canova G., Van Houtte P., Molinari A. // Textures and Microstructures. – 1991. – Vol. 14-18. – P. 1135-1140. DOI: 10.1155/ TSM.14-18.1135.
133. Wei Y.J., Anand L. Grain-boundary sliding and separation in polycrystalline metals: application to nanocrystalline fcc metals // J. Mechanics and Physics of Solids. – 2004. – Vol. 52. – P. 2587-2616. DOI: 10.1016/j.jmps.2004. 04.006.
134. Xia S., El-Azab A. Computational modelling of mesoscale dislocation patterning and plastic deformation of single crystals // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. – 2015. – Vol.23, No.5. – 055009. DOI: 10.1088/0965-0393/23/5/055009
135. Xia Z., Ellyin F. Nonproportional multiaxial cyclic loading: experiments and constitute modeling // J. Appl. Mech. – 1991. – Vol.58, No.2. – P.317-325. DOI:10.1115/1.2897188

136. Yi H.Y. et al. Work hardening behavior of nanotwinned austenitic grains in a metastable austenitic stainless steel / Yi H.Y., Yan F.K., Tao N.R., Lu K. / Scripta Mater. – 2016. – Vol. 114. – P.133-136. DOI:10.1016/j.scriptamat.2015.12.0211
137. Zirkle T., Zhu T., McDowell D. L. Micromechanical crystal plasticity back stress evolution within FCC dislocation substructure // Int. J. Plasticity. – 2021. – Vol.146. – № 103082. DOI: 10.1016/j.ijplas.2021.103082