

УДК 539.52

МНОГОУРОВНЕВЫЕ МОДЕЛИ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МЕТАЛЛОВ: СОПОСТАВЛЕНИЕ ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ СООТНОШЕНИЙ ДЛЯ КРИСТАЛЛИТОВ*

© 2017 г.

Швейкин А.И.

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Пермь, Российская Федерация*

shveykin@pstu.ru

Поступила в редакцию 10.10.2017

Приводятся и сопоставляются различные формулировки геометрически нелинейных упруговязкопластических определяющих соотношений мезоуровня (уровня отдельного кристаллита), являющиеся ключевым элементом многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов; при определении напряжений в этих моделях используются различные варианты упругих соотношений. Рассматриваются наиболее популярные соотношения в конечной форме в разгруженной конфигурации, соотношения в конечной форме с использованием разложения движения с явным выделением движения подвижной системы координат, эквивалентные последним определяющие соотношения в скоростной формулировке, а также их линейное приближение, соотношения в скоростной форме в актуальной конфигурации. Приводятся выкладки, показывающие эквивалентность или близость определяемых при одинаковых кинематических воздействиях напряжений для рассматриваемых формулировок. Результаты численных расчетов, проведенных для случайно выбранных кинематических нагружений, подтверждают приведенные выводы о близости формулировок моделей мезоуровня. Отмечено, что формулировка с использованием разложения движения с явным выделением подвижной системы координат позволяет теоретически обоснованно перейти к близкой формулировке в скоростной форме в актуальной конфигурации, которая является предпочтительной для численного решения краевых задач с изменяющимися контактными условиями, необходимого при моделировании технологических процессов термомеханической обработки.

Ключевые слова: многоуровневые модели поликристаллов, большие деформации, определяющие соотношения, внутренние переменные, упруговязкопластичность.

Введение

Физико-механические свойства материала определяются состоянием его структуры, которая существенно изменяется при неупругом деформировании. Поэтому для совершенствования существующих и разработки новых методов термомехани-

* Выполнено при поддержке РФФИ (грант №15-08-06866-а).

ческой обработки необходимо построение математических моделей материалов, способных описывать эволюцию структуры при деформировании и учитывать ее влияние на параметры процесса и эффективные свойства материала на макроуровне. В последние десятилетия интенсивно развиваются многоуровневые модели различных материалов [1–5], нацеленные на явное описание элементов структуры и механизмов деформирования. Для этого в многоуровневых моделях металлов и сплавов используется подход, основанный на введении внутренних переменных [6–9]. К настоящему времени значительное развитие получили построенные в рамках этого подхода модели поликристаллических металлов и сплавов, базирующиеся на физических теориях упруговязкопластичности (краткие обзоры приведены в [4, 5, 10–13]).

Ключевым элементом многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов являются формулировки кинематических и определяющих соотношений на мезоуровне (уровне отдельных кристаллитов). Следует отметить, что эти соотношения должны быть применимы для больших градиентов перемещений, которые характерны для большинства процессов термомеханической обработки металлов и сплавов.

В статье приводятся и сопоставляются различные формулировки упруговязкопластических определяющих соотношений мезоуровня, используемые в многоуровневых моделях поликристаллических металлов и сплавов, приводятся иллюстрирующие результаты.

1. Формулировки определяющих соотношений мезоуровня многоуровневых моделей металлов и сплавов

В [14] для использования в многоуровневых моделях поликристаллических металлов и сплавов предлагается модель мезоуровня (для кристаллита), основанная на следующем представлении движения среды на мезоуровне:

$$\mathbf{f} = \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{x}^T = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p = \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} \cdot \mathbf{f}^p, \quad (1)$$

где \mathbf{f} – градиент деформации; $\overset{\circ}{\nabla}$ – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации; \mathbf{x} – радиус-вектор материальных частиц; $\mathbf{f}^e, \mathbf{f}^p$ – упругая и пластическая составляющие градиента деформации; $\mathbf{r} = \mathbf{k}_i (\mathbf{k}^i|_{t=0}) \equiv \mathbf{k}_i \mathbf{k}_0^i$ – ортогональный тензор, преобразующий отсчетный базис жесткой подвижной системы координат (ПСК) \mathbf{k}_0^i в текущий \mathbf{k}_i , вариант определения \mathbf{r} будет показан далее; $\bar{\mathbf{f}}^e$ – составляющая градиента деформации, характеризующая упругие искажения решетки. Согласно (1), движение среды на мезоуровне представляется последовательностью пластических деформаций (с неизменным положением подвижной системы координат), поворота подвижной системы координат вместе с материалом и упругого искажения решетки относительно подвижной системы координат. В явном разделении последних составляющих в представлении движения среды (градиента деформации) заключается отличие от классического представления градиента деформации [15, 16]:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p. \quad (2)$$

Важно отметить, что при принятии (1) можно использовать любую физически обоснованную модель для квазитвердого [17, 18] движения ПСК, например на основе рассмотрения взаимодействия дислокаций соседних зерен [19, 20].

Пластическая составляющая градиента деформации \mathbf{f}^p определяется следующим образом [14]:

$$\dot{\mathbf{f}}^p \cdot (\mathbf{f}^p)^{-1} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}, \quad (3)$$

где $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения (в отсчетной конфигурации), K – число систем скольжения для рассматриваемого типа кристаллитов (использовалось удвоенное число систем скольжения – для рассмотрения отрицательных сдвигов введены отдельные системы скольжения). Для установления скоростей сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}$ на системах скольжения во многих моделях [4, 5, 10–13] используется вязкопластическое соотношение, предложенное в работах [21, 22]:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 (\tau^{(k)} / \tau_c^{(k)})^m H(\tau^{(k)} - \tau_c^{(k)}), \quad (4)$$

где $\tau^{(k)}$, $\tau_c^{(k)}$ – сдвиговое и критическое сдвиговое напряжения на k -й системе скольжения, $H(\cdot)$ – функция Хэвисайда, $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига по системе скольжения при достижении касательным напряжением критического напряжения сдвига, m – показатель скоростной чувствительности материала; при проведении расчетов использовались значения параметров $\dot{\gamma}_0 = 0,001 \text{ с}^{-1}$, $1/m = 0,012$.

Сдвиговое напряжение на k -й системе скольжения определяется согласно соотношению:

$$\tau^{(k)} = J \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}, \quad (5)$$

где $J = \rho / \hat{\rho} = \det \mathbf{f}$ – отношение плотностей материала в отсчетной и текущей конфигурации; $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши; $J \boldsymbol{\sigma}$ – (взвешенный) тензор напряжений Кирхгофа; $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения в актуальной конфигурации. Стоит отметить, что во многих работах (например, в [23, 24]) используется приближенное соотношение

$$\tau^{(k)} = (J(\mathbf{f}^e)^T \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{f}^e)^{-T}) : (\mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)}).$$

Определенные по этому соотношению касательные напряжения при малых упругих деформациях (характерных для металлов) близки к вычисленным согласно (5), но не в точности им равны (при использовании такого представления применяются не строго единичные векторы направления скольжения $\mathbf{b}^{(k)}$, $(\mathbf{f}^e)^T = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{b}^{(k)}$ и нормали к плоскости скольжения $(\mathbf{f}^e)^{-T} \cdot \mathbf{n}^{(k)}$ в актуальной конфигурации).

Критические напряжения сдвига $\tau_c^{(k)}$ по системам скольжения в общем случае являются функциями накопленных к текущему моменту сдвигов и истории их изменения; уравнения для их изменения – важный элемент конститутивных моделей. Обоснование указанных соотношений с учетом физики взаимодействия дефектных структур – это одно из направлений развития многоуровневых моделей металлов и сплавов [24–27]. При проведении расчетов для настоящей статьи во всех случаях использовался закон упрочнения, описанный в [23, 28]:

$$\dot{\tau}_c^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^K h^{\alpha\beta} (\boldsymbol{\sigma}) \dot{\gamma}^{(\beta)}, \quad h^{\alpha\beta} = [q_l + (1 - q_l) \delta^{\alpha\beta}] h^\beta, \quad h^\beta = h_0 |1 - \tau_c^{(\beta)} / \tau_{sat}|^a, \quad (6)$$

где параметр латентного упрочнения q_l принимает значение 1 для компланарных и

значение 1,4 для некомпланарных систем скольжения (с номерами α и β); при проведении расчетов использовались значения $h_0 = 180$ МПа, $\tau_{sat} = 148$ МПа, $a = 2,25$, начальные значения критических напряжений для всех систем скольжения $\tau_c^{(\alpha)}(0) = 16$ МПа (соответствуют поликристаллической меди [23, 28]).

С помощью представления (1) формулируется определяющее соотношение мезоуровня в терминах разгруженной (с $(\mathbf{f}^e)^{-1}$) конфигурации [14]:

$$\boldsymbol{\kappa} = \bar{\mathbf{n}} : \bar{\mathbf{c}}^e, \quad (7)$$

где используются определенные в этой конфигурации второй тензор Пиолы–Кирхгофа

$$\bar{\boldsymbol{\kappa}} = \bar{\kappa}^{ij} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j, \quad \bar{\rho} / \hat{\rho} (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} = J(\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T},$$

$\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши; $\bar{\rho}$, $\hat{\rho}$ – плотность в отсчетной и актуальной конфигурациях; четырехвалентный тензор упругих характеристик $\bar{\mathbf{n}} = \bar{n}^{ijkl} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n$ и упругая составляющая $\bar{\mathbf{c}}^e$ правого тензора деформаций Коши – Грина $\bar{\mathbf{c}}^e$ ($\bar{\mathbf{c}}^e = \bar{c}^{ij} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j = ((\bar{\mathbf{f}}^e)^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I})/2$, \mathbf{I} – единичный тензор).

Подвижная система координат, положение которой определяется тензором \mathbf{r} , для анизотропных кристаллитов должна быть связана с элементами материальной симметрии – с элементами симметрии решетки [14, 18, 29], например с кристаллографическими плоскостью и направлением. При проведении расчетов для получения результатов, приведенных в настоящей статье, во всех случаях использовался спин ПСК [18]:

$$\bar{\boldsymbol{\omega}} = \dot{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}^T = \dot{\mathbf{k}}_i \mathbf{k}_i = -(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_3 + (\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_1) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{l}^e \cdot \mathbf{k}_2) \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2, \quad (8)$$

где $\mathbf{l}^e = \dot{\mathbf{f}}^e \cdot (\mathbf{f}^e)^{-1}$ – упругая составляющая градиента скорости перемещений \mathbf{l} . Соотношение (8) согласуется с принятой в (1) независимостью положения ПСК и кристаллографической системы координат (КСК) от пластических деформаций за счет движения краевых дислокаций по системам скольжения.

Совокупность соотношений (1), (3)–(8) составляет конститутивную модель мезоуровня [14], позволяющую по кинематическим воздействиям определять на данном уровне изменяющиеся отклик (напряжения) и внутренние переменные, характеризующие структуру. Обозначив модель (1), (3)–(8) как модель **A**, рассмотрим далее альтернативные формулировки.

Во многих работах по физическим теориям пластичности [23, 24, 30, 31] используются соотношения в «классической» разгруженной конфигурации, получаемой из актуальной аффинным преобразованием $(\mathbf{f}^e)^{-1}$:

$$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{n}_0 : \mathbf{c}^e, \quad (9)$$

где $\boldsymbol{\kappa} = J(\mathbf{f}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{f}^e)^{-T}$ – второй тензор Пиолы – Кирхгофа, $\mathbf{c}^e = ((\mathbf{f}^e)^T \cdot \mathbf{f}^e - \mathbf{I})/2$ – мера деформации Коши – Грина, $\mathbf{n}_0 = \bar{n}^{ijmn} \mathbf{k}_{0i} \mathbf{k}_{0j} \mathbf{k}_{0m} \mathbf{k}_{0n}$ – тензор упругих свойств.

Если использовать представление движения (1), то соотношение (9) можно записать в виде:

$$J \mathbf{r}^T \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} \cdot \mathbf{r} = \bar{n}^{ijmn} \mathbf{k}_{0i} \mathbf{k}_{0j} \mathbf{k}_{0m} \mathbf{k}_{0n} : (\mathbf{r}^T \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e \cdot \mathbf{r} - \mathbf{I})/2.$$

После преобразований имеем

$$J \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} = \bar{\pi}^{ijmn} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0i}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0j}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0m}) (\mathbf{r} \cdot \mathbf{k}_{0n}) : ((\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I})/2,$$

$$J \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\bar{\mathbf{f}}^e)^{-T} = \bar{\pi}^{ijmn} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n : ((\bar{\mathbf{f}}^e)^T \cdot \bar{\mathbf{f}}^e - \mathbf{I})/2.$$

Последнее соотношение совпадает с (7). Таким образом, напряжения Коши, получаемые при использовании соотношений (7) и (9), совпадают (в разделе 2 приводятся подтверждающие это положение результаты численных расчетов).

Конститутивную модель мезоуровня, включающую соотношения (2), (3)–(6), (8), (9), обозначим как модель **Б**. Несмотря на то, что при использовании одинаковой модели ротации решетки (например, со спином (8)) модели **А** и **Б** будут давать одинаковые напряжения, важно обратить внимание на отличие при их построении: при формулировке модели **А** ключевым является введение разложения движения (1) с явным выделением подвижной системы координат. Это позволяет перейти к близкой формулировке в скоростной форме в актуальной конфигурации, которая приводится далее и которая является предпочтительной для численного решения краевых задач с изменяющимися контактными условиями (в технологических процессах термомеханической обработки).

В альтернативной формулировке для металлов и сплавов в силу малости упругих искажений $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$ можно использовать линейаризованные соотношения в разгруженной с $(\bar{\mathbf{f}}^e)^{-1}$ конфигурации (принимается близость этой конфигурации к актуальной):

$$J\boldsymbol{\sigma} = \bar{\pi} : (\bar{\mathbf{f}}^e + (\bar{\mathbf{f}}^e)^T - 2\mathbf{I})/2. \quad (10)$$

Конститутивную модель мезоуровня, включающую соотношения (1), (3)–(6), (8), (10), обозначим как модель $\mathbf{A}_{\text{лин}}$.

При использовании представления движения (1) естественным образом осуществляется эквивалентная формулировка определяющего соотношения в скоростной форме [14]: в базе разгруженной кристаллографической системы координат (в базе ПСК \mathbf{k}_i) компоненты тензора упругих свойств $\bar{\pi}$ полагаются постоянными. С учетом последнего в базе подвижной системы координат можно перейти к эквивалентной скоростной форме соотношения (7): $\dot{\bar{\mathbf{k}}} = \bar{\pi}_{ijmn} \dot{\bar{\mathbf{c}}}^{nm}$. С учетом физического смысла коротационной производной [18] с позиций неподвижного наблюдателя в лабораторной системе отсчета последнее соотношение принимает вид [14]:

$$\bar{\mathbf{k}}^{cr} = \bar{\pi} : (\bar{\mathbf{c}}^e)^{cr}, \quad (11)$$

где $\bar{\mathbf{k}}^{cr} = \dot{\bar{\mathbf{k}}} + \bar{\mathbf{k}} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{k}}$, $(\bar{\mathbf{c}}^e)^{cr} = \dot{\bar{\mathbf{c}}}^e + \bar{\mathbf{c}}^e \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \bar{\mathbf{c}}^e$ – коротационные производные 2-го тензора напряжений Пиолы – Кирхгофа и упругой составляющей тензора деформаций Коши – Грина соответственно. Обозначим совокупность соотношений (1), (3)–(6), (8), (11) как модель $\mathbf{A}_{\text{скор}}$.

В [32] показано, что для металлов и сплавов при малых упругих искажениях $\bar{\mathbf{f}}^e \approx \mathbf{I}$ модель $\mathbf{A}_{\text{скор}}$ дает близкие результаты к скоростной формулировке в актуальной конфигурации:

$$\mathbf{k}^{cr} = \bar{\pi} : \left(\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \bar{\boldsymbol{\omega}} - \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \right), \quad (12)$$

где $\mathbf{k} = J\boldsymbol{\sigma}$ – взвешенный тензор напряжений Кирхгофа, $\mathbf{k}^{cr} = d\mathbf{k}/dt + \mathbf{k} \cdot \bar{\boldsymbol{\omega}} - \bar{\boldsymbol{\omega}} \cdot \mathbf{k}$ – его коротационная производная. В качестве меры скорости деформации используется $(\hat{\nabla} \mathbf{v}^T - \bar{\boldsymbol{\omega}})$, тензор упругих свойств определен как $\bar{\pi} = \bar{\pi}^{ijmn} \mathbf{k}_i \mathbf{k}_j \mathbf{k}_m \mathbf{k}_n$ (компо-

ненты постоянны в ПСК, вращающейся с $\bar{\omega}$), что позволяет обеспечить выполнение принципа независимости определяющего соотношения от выбора системы отсчета [17]. Обозначим совокупность соотношений (3)–(6), (8), (12) как модель $\mathbf{V}_{\text{скор}}$.

Таким образом, приведены некоторые формулировки конститутивных моделей мезоуровня в многоуровневых моделях неупругости поликристаллических металлов и сплавов. В следующем разделе сопоставляются результаты их применения (при одинаковом во всех случаях определении спина).

2. Иллюстрирующие результаты

Был проведен ряд численных расчетов с целью сопоставления получаемых напряжений макроуровня и мезоуровня (для отдельных кристаллитов) при использовании различных рассмотренных конститутивных моделей мезоуровня. Моделировался представительный объем ГЦК-поликристалла. В рамках статистической модели он представлялся выборкой из 343 кристаллитов, начальные ориентации которых распределены случайно по равномерному закону. Упругие свойства на мезоуровне (постоянные для наблюдателя в ПСК) соответствуют меди, независимые компоненты тензора свойств в ПСК: $\pi_{1111} = 168,4$ ГПа, $\pi_{1122} = 121,4$ ГПа, $\pi_{1212} = 75,4$ ГПа [33]. Параметры моделей для описания неупругого деформирования были определены при решении задачи идентификации для модели \mathbf{A} как удовлетворительно описывающие экспериментально наблюдаемый отклик поликристалла. На рис. 1 приведены зависимость компоненты тензора напряжений $-\Sigma_{33}$ на макроуровне от компоненты $-H_{33}$ логарифмической меры деформации при одноосном сжатии (рис. 1а) и зависимость компоненты $-\Sigma_{23}$ от величины сдвига γ при простом сдвиге (рис. 1б). На рисунке обозначено: точки – экспериментальные данные [28], кривая – результаты, полученные в модели \mathbf{A} . Для поликристалла напряжения на макроуровне получаются осреднением напряжений мезоуровня [20].

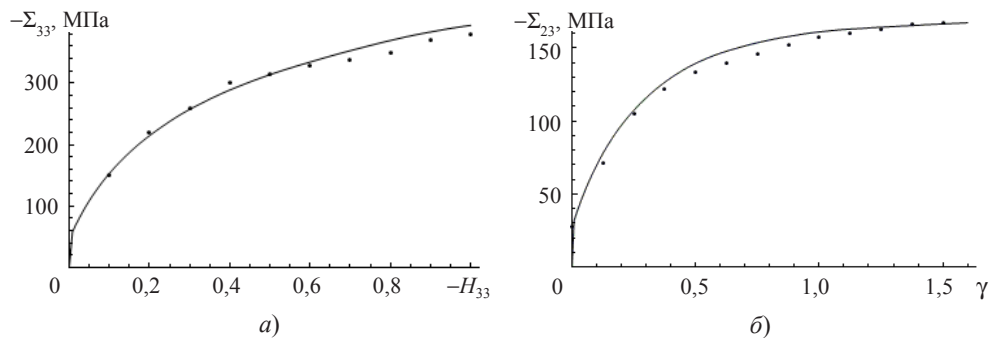


Рис. 1

Рассматривалось аффинное деформирование при однородном кинематическом нагружении образца, соответствующего представительному объему поликристалла [4], прямоугольного в отсчетной конфигурации параллелепипеда с квадратом в поперечном сечении и длиной стороны L . Поперечное сечение образца расположено в плоскости OX_1X_2 фиксированной лабораторной системы координат. В силу однородности деформирования радиус-вектор материальной точки тела в произвольный момент времени t определяется согласно $\mathbf{r}(t) = \mathbf{f}(t) \cdot q^i \mathbf{p}_i$, где $\mathbf{f}(t)$ – градиент деформации, q^i – лагранжевы координаты рассматриваемой точки, \mathbf{p}_i – базис неподвижной лабораторной системы координат.

Движение определено градиентом деформации (выбор движения может быть произвольным):

$$\mathbf{f}(t) = \frac{1}{1 + 6r_d/h \sin \omega t} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_1 + (1 + 6r_d/h \sin \omega t) \mathbf{p}_2 \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 \mathbf{p}_3 + \frac{7r_d/h}{1 + \sin(\omega t/5) - \cos(\omega t/3)} \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2, \quad (13)$$

где $\omega = 0,001\pi$, $r_d/h = 0,1$ – постоянный параметр, деформирование рассматривается на интервале времени $t = [0, 1000 \text{ с}]$. Для иллюстрации на рис. 2 приведена траектория движения точки тела с лагранжевыми координатами $(0, L, 0)$ (в плоскости OX_1X_2); в начальный момент положение точки определяется координатами $X_1/L = 0$, $X_2/L = 1$, $X_3 = 0$. Нагружение задано с наложением условия изохоричности $I_3(\mathbf{f}(t)) = 1$, чтобы не наблюдалось доминирования шаровой составляющей тензора напряжений при больших деформациях. При неизохорических нагружениях характер результатов не меняется (в плане близости напряжений, определяемых в различных моделях).

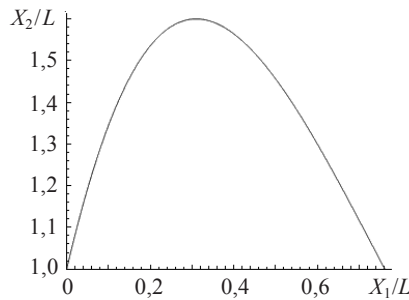


Рис. 2

На рис. 3 приведены зависимости от времени компонент тензора напряжений Коши на макроуровне (в лабораторной системе координат) для ГЦК-поликристалла при использовании модели **A** мезоуровня (рис. 3а) и при использовании модели **B** мезоуровня (рис. 3б).

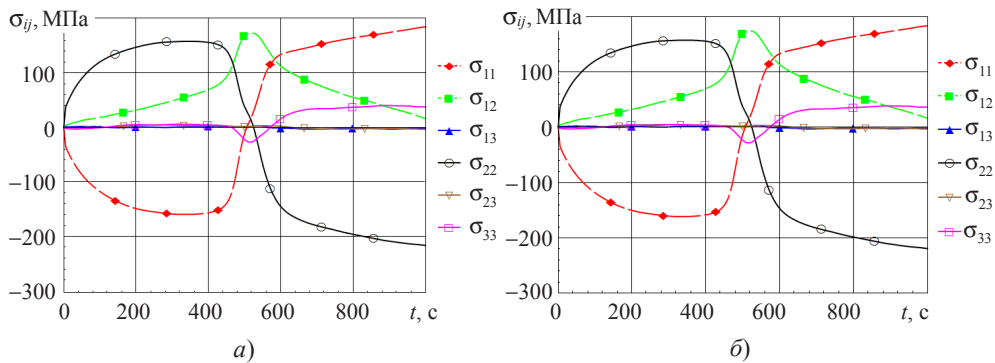


Рис. 3

Наблюдается практическая идентичность соответствующих кривых на рис. 3а и 3б. Для численной оценки отклонения результатов введем норму:

$$\Delta_G = \max_t |\Sigma_G(t) - \Sigma_A(t)|, \quad (14)$$

где модуль определяется формулой $|\mathbf{S}| = \sqrt{\mathbf{S}:\mathbf{S}^T}$; $\Sigma_G(t)$, $\Sigma_A(t)$ – изменения макро-напряжений, полученные при использовании модели **G** мезоуровня (одной из вышеприведенных) и модели **A** мезоуровня.

В таблице 1 приведены результаты определения отклонения макронапряжений при использовании разных моделей от макронапряжений, получаемых при использовании модели **A**.

Таблица 1

Модель	A	A _{лин}	A _{скор}	Б	В _{скор}
Норма Δ_G , МПа	0	3,516	0	0	3,428
Отношение нормы к максимальной в расчете интенсивности напряжений, %	0	0,996	0	0	0,971

Нулевые отклонения, указанные в таблице 1, означают отклонения не выше порядка компьютерной погрешности при работе с действительными числами.

Результаты, приведенные в таблице, свидетельствуют о близости напряжений, получаемых при использовании различных формулировок моделей мезоуровня, подтверждая корректность вышеприведенных теоретических соображений.

На рис. 4 показаны зависимости от времени компонент (в лабораторной системе координат) тензора напряжений Коши мезоуровня для случайно выбранного кристаллита при использовании модели **A** (рис. 4а) и при использовании модели **В**_{скор} (рис. 4б). Начальные ориентации кристаллографической и подвижной систем координат кристаллита совпадают и определяются путем последовательного поворота начально совмещенной с лабораторной системой координат кристаллографической системы координат для ГЦК-кристалла вокруг оси Ox^1 на угол $\phi_1 = -1,42$, вокруг оси Ox^2 на угол $\phi_2 = 3,89$, вокруг оси Ox^3 на угол $\phi_3 = 2,07$.

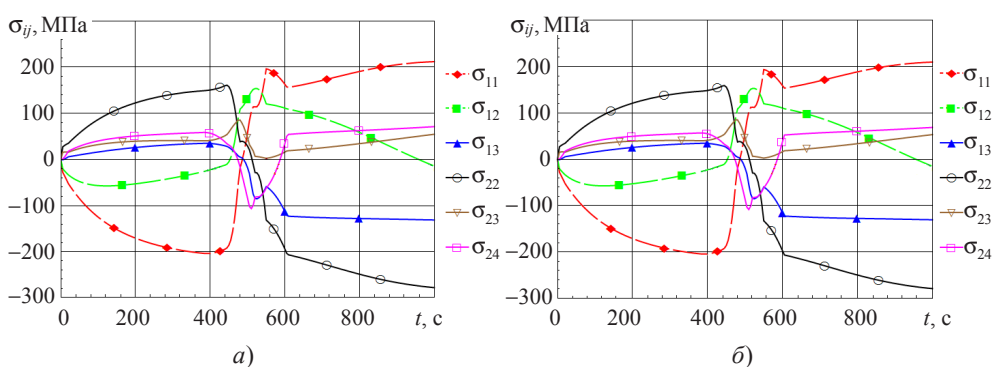


Рис. 4

Мезонапряжения для рассмотренного кристаллита практически неотличимы. Для численной оценки отклонения результатов используем норму, аналогичную (14):

$$\delta_G = \max_t |\sigma_G(t) - \sigma_A(t)|, \quad (15)$$

где $\sigma_G(t)$, $\sigma_A(t)$ – изменения мезонапряжений, полученные при использовании модели **G** мезоуровня и модели **A** мезоуровня. В таблице 2 приведены результаты от-

клонения мезонапряжений при использовании разных моделей от получаемых при использовании модели А.

Таблица 2

Модель	А	А _{лин}	А _{скор}	Б	В _{скор}
Норма Δ_G , МПа	0	3,661	0	0	7,051
Отношение нормы к максимальной в расчете интенсивности напряжений, %	0	0,731	0	0	1,409

Результаты, приведенные на рис. 4 и в таблице 2, свидетельствуют о близости мезонапряжений, что выполняется для подавляющего числа кристаллитов (практически для всех случайных ориентировок). В специальных случаях отклонения компонент мезонапряжений могут в определенный момент превышать 10 МПа (но не более 23 МПа), что связано с особенностями движения изображающей точки в пространстве напряжений вблизи поверхности текучести [34] при переходах между окрестностями вершин (после переходов напряжения становятся близкими). В силу малости доли таких кристаллитов (38 кристаллитов из 343) напряжения на макромасштабном уровне, получаемые в статистической конститутивной модели при использовании разных моделей мезоуровня, отличаются незначительно (см. табл. 1).

Заключение

Рассмотрены различные геометрически нелинейные упруговязкопластические определяющие соотношения мезоуровня (уровня отдельного кристаллита) многоуровневых моделей поликристаллических металлов и сплавов. Описаны наиболее популярные соотношения в конечной форме в разгруженной конфигурации, соотношения в конечной форме с использованием разложения движения с явным выделением движения подвижной системы координат, эквивалентные последним определяющие соотношения в скоростной формулировке, а также линейное их приближение и соотношения в скоростной форме в актуальной конфигурации. Приведены аналитические выкладки, показывающие эквивалентность или близость (в плане определяемых при одинаковых кинематических воздействиях напряжений) рассматриваемых формулировок. Эти выводы подтверждены результатами численных расчетов, проведенных для случайно выбранного кинематического нагружения. При этом отмечается, что формулировка с использованием разложения движения с явным выделением движения подвижной системы координат позволяет теоретически обоснованно перейти к близкой формулировке в скоростной форме в актуальной конфигурации, предпочтительной для численного решения краевых задач с изменяющимися контактными условиями, необходимого при моделировании технологических процессов термомеханической обработки.

Список литературы

1. Лихачев В.А., Малинин В.Г. *Структурно-аналитическая теория прочности*. СПб.: Наука, 1993. 471 с.
2. Панин В.Е., Егорушкин В.Е., Макаров П.В. и др. *Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов*: В 2 т. Новосибирск: Наука, Сибирская издат. фирма РАН, 1995. Т. 1. 298 с. Т. 2. 320 с.
3. Макаров П.В. Моделирование процессов деформации и разрушения на мезоуровне. *Изв. РАН. Механика твердого тела*. 1999. №5. С. 109–130.

4. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели. *Физическая мезомеханика*. 2011. Т. 14. №4. С. 17–28.
5. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели. *Физическая мезомеханика*. 2011. Т. 14. №5. С. 5–30.
6. Guo Y.B., Wen Q., Horstemeyer M.F. An internal state variable plasticity-based approach to determine dynamic loading history effects on material property in manufacturing processes. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2005. Vol. 47. P. 1423–1441.
7. McDowell D.L. Internal state variable theory. In: *Handbook of Materials Modeling*. S. Yip (Ed.). Netherlands. Springer, 2005. P. 1151–1169.
8. Трусов П.В., Швейкин А.И. *Теория пластичности*. Пермь: Изд-во Перм. национ. иссл. политехн. ун-та, 2011. 419 с.
9. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013). *Mechanics Research Communications*. 2015. <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechrescom.2015.06.00>.
10. Ghoniem N.M., Busso E.P., Kioussis N., Huang H. Multiscale modeling of nanomechanics and micromechanics: an overview. *Philosophical Magazine*. 2003. Vol. 83. No 31–34. P. 3475–3528.
11. McDowell D.L. Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials. *Materials Science and Engineering: Reports*. 2008. Vol. 62. P. 67–123.
12. Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*. 2010. Vol. 58. P. 1152–1211.
13. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity. *International Journal of Plasticity*. 2010. Vol. 26. P. 1280–1309.
14. Трусов П.В., Швейкин А.И. О разложении движения и определяющих соотношениях в геометрически нелинейной упруговязкопластичности кристаллитов. *Физическая мезомеханика*. 2016. Т. 19. №3. С. 25–38.
15. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1960. Vol. 4. P. 273–334.
16. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain. *ASME. Journal of Applied Mechanics*. 1969. Vol. 36. P. 1–6.
17. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. *Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения*. М.: Наука, 1986. 232 с.
18. Трусов П.В., Швейкин А.И., Янц А.Ю. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования. *Физическая мезомеханика*. 2016. Т. 19. №2. С. 47–65.
19. Рыбин В.В. *Большие пластические деформации и разрушение металлов*. М.: Металлургия, 1986. 224 с.
20. Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры. *Физическая мезомеханика*. 2012. Т. 15. №1. С. 33–56.
21. Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in Applied Mechanics*. 1983. Vol. 23. P. 1–115.
22. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metallurgica*. 1985. Vol. 33. No 6. P. 923–953.
23. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2004. Vol. 93. P. 5359–5383.
24. Khadyko M., Dumoulin S., Cailletaud G., Hopperstad O.S. Latent hardening and plastic anisotropy evolution in AA6060 aluminium alloy. *International Journal of Plasticity*. 2016. Vol. 76. P. 51–74.
25. Holmedal B., van Houtte P., An Y. A crystal plasticity model for strain-path changes in metals. *International Journal of Plasticity*. 2008. Vol. 24. P. 1360–1379.
26. Трусов П.В., Волегов П.С. Определяющие соотношения с внутренними переменными

ми и их применение для описания упрочнения в монокристаллах. *Физическая мезомеханика*. 2009. Т. 12. №5. С. 65–72.

27. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys. *International Journal of Plasticity*. 2013. Vol. 42. P. 94–212.

28. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1992. Vol. 341 (1662). P. 443–477.

29. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *International Journal of Solids and Structures*. 1973. Vol. 9. P. 725–740.

30. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. *Crystal Plasticity*. In: *Handbook of Materials Modeling*. S. Yip (Ed.). Netherlands. Springer, 2005. P. 1133–1149.

31. McGinty R.D., McDowell D.L. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*. 2006. Vol. 22. P. 996–1025.

32. Швейкин А.И., Трусов П.В. Сопоставление сформулированных в терминах актуальной и разгруженной конфигураций геометрически нелинейных упруговязкопластических определяющих соотношений для кристаллитов. *Физическая мезомеханика*. 2016. Т. 19. №5. С. 48–57.

33. Шермергор Т.Д. *Теория упругости микронеднородных сред*. М.: Наука, 1977. 400 с.

34. Швейкин А.И., Шарифуллина Э.Р. Анализ конститутивных соотношений для описания внутризеренного дислокационного скольжения в рамках двухуровневой упруговязкопластической модели ГЦК-поликристаллов. *Вестник Тамбовского государственного университета*. 2013. Т. 18. Вып. 4. С. 1665–1666.

References

1. Likhachev V.A., Malinin V.G. *Strukturno-analiticheskaya teoriya prochnosti*. [Structural and Analytical Theory of Strength]. St. Petersburg. Nauka Publ. 1993. 471 p. (In Russian).

2. Panin V.E., Egorushkin V.E., Makarov P.V. et al. *Fizicheskaya mezomekhanika i kompyuternoe konstruirovaniye materialov. V 2-kh t.* [Physical Mesomechanics and Computer Design of Materials. In 2 vols.]. Novosibirsk. Nauka Publ. 1995. Vol. 1. 298 p. Vol. 2. 320 p. (In Russian).

3. Makarov P.V. Modelirovaniye protsessov deformatsii i razrusheniya na mezourovne [Modeling of deformation and fracture processes at the mesolevel]. *Izvestiya RAN. Mekhanika tverdogo tela [Mechanics of Solids]*. 1999. No 5. P. 109–130 (In Russian).

4. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevyye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Statisticheskie modeli [Multilevel physical models of mono- and polycrystals. Statistical models]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2011. Vol. 14. No 4. P. 17–28 (In Russian).

5. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevyye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Pryamyie modeli [Multilevel physical models of mono- and polycrystals. Direct models]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2011. Vol. 14. No 5. P. 5–30 (In Russian).

6. Guo Y.B., Wen Q., Horstemeyer M.F. An internal state variable plasticity-based approach to determine dynamic loading history effects on material property in manufacturing processes. *International Journal of Mechanical Sciences*. 2005. Vol. 47. P. 1423–1441.

7. McDowell D.L. Internal state variable theory. In: *Handbook of Materials Modeling*, S. Yip (Ed.). Netherlands. Springer. 2005. P. 1151–1169.

8. Trusov P.V., Shveykin A.I. *Teoriya plastichnosti [Theory of Plasticity]*. Perm. Permskiy politekhnicheskii. un-t Publ. 2011. 419 p. (In Russian).

9. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013). *Mechanics Research Communications*. 2015. <http://dx.doi.org/10.1016/j.mechrescom.2015.06.00>.

10. Ghoniem N.M., Busso E.P., Kioussis N., Huang H. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview. *Philosophical Magazine*. 2003. Vol. 83. No 31–34. P. 3475–3528.

11. McDowell D.L. Viscoplasticity of heterogeneous metallic materials. *Materials Science and Engineering: Reports*. 2008. Vol. 62. P. 67–123.

12. Roters F., Eisenlohr P., Hantcherli L., Tjahjanto D.D., Bieler T.R., Raabe D. Overview of

- constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*. 2010. Vol. 58. P. 1152–1211.
13. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity. *International Journal of Plasticity*. 2010. Vol. 26. P. 1280–1309.
 14. Trusov P.V., Shveykin A.I. O razlozhenii dvizheniya i opredelyayushchikh sootnosheniyakh v geometricheski nelineynoy uprugovyazkoplastichnosti kristallitov [On motion decomposition and constitutive relations in geometrically nonlinear elastoviscoplasticity of crystallites]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2016. Vol. 19. No 3. P. 25–38 (In Russian).
 15. Kröner E. Allgemeine Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 1960. Vol. 4. P. 273–334.
 16. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain. *ASME Journal of Applied Mechanics*. 1969. Vol. 36. P. 1–6.
 17. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I. *Bolshie uprugoplasticheskie deformatsii: teoriya, algoritmy, prilozheniya [Large Elastoplastic Deformations: Theory, Algorithms, Applications]*. Moscow. Nauka Publ. 1986. 232 p. (In Russian).
 18. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yants A.Yu. O razlozhenii dvizheniya, nezavisimyykh ot vybora sistemy otscheta proizvodnykh i opredelyayushchikh sootnosheniyakh pri bol'shikh gradientakh peremeshcheniy: vzglyad s pozitsiy mnogourovnevnogo modelirovaniya [Motion decomposition, frame-independent derivatives and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2016. Vol. 19. No. 2. P. 47–65 (In Russian).
 19. Rybin V.V. *Bolshie plasticheskie deformatsii i razrushenie metallov [Large Plastic Deformation and Fracture of Metals]*. Moscow. Metallurgiya Publ. 1986. 224 p. (In Russian).
 20. Trusov P.V., Shveykin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Mnogourovnevnye modeli neuprugogo deformirovaniya materialov i ikh primeneniye dlya opisaniya evolyutsii vnutrenney struktury [Multilevel models of inelastic deformation of materials and their application to describe the internal structure evolution]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2012. Vol. 15. No 1. P. 33–56 (In Russian).
 21. Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals. *Advances in Applied Mechanics*. 1983. Vol. 23. P. 1–115.
 22. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metallurgica*. 1985. Vol. 33. No 6. P. 923–953.
 23. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*. 2004. Vol. 93. P. 5359–5383.
 24. Khadyko M., Dumoulin S., Cailletaud G., Hopperstad O.S. Latent hardening and plastic anisotropy evolution in AA6060 aluminium alloy. *International Journal of Plasticity*. 2016. Vol. 76. P. 51–74.
 25. Holmedal B., van Houtte P., An Y. A crystal plasticity model for strain-path changes in metals. *International Journal of Plasticity*. 2008. Vol. 24. P. 1360–1379.
 26. Trusov P.V., Volegov P.S. Opredelyayushchie sootnosheniya s vnutrennimi peremennymi i ikh primeneniye dlya opisaniya uprochneniya v monokristallakh [Constitutive relations with internal variables and their application for the description of hardening in single crystals]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2009. Vol. 12. No 5. P. 65–72 (In Russian).
 27. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys. *International Journal of Plasticity*. 2013. Vol. 42. P. 194–212.
 28. Bronkhorst C.A., Kalidindi S.R., Anand L. Polycrystalline plasticity and the evolution of crystallographic texture in FCC metals. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1992. Vol. 341 (1662). P. 443–477.
 29. Mandel J. Equations constitutives et directeurs dans les milieux plastiques et viscoplastiques. *International Journal of Solids and Structures*. 1973. Vol. 9. P. 725–740.
 30. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. *Crystal Plasticity*. In: *Handbook of Materials Modeling*. S. Yip (Ed.). Netherlands. Springer. 2005. P. 1133–1149.
 31. McGinty R.D., McDowell D.L. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*. 2006. Vol. 22. P. 996–1025.

32. Shveykin A.I., Trusov P.V. Sopostavlenie sformulirovannykh v terminakh aktual'noy i razgruzhennoy konfiguratsiy geometricheski nelineynykh uprugoviyazkoplavicheskikh opredelyayushchikh sootnosheniy dlya kristallitov [Correlation between geometrically nonlinear elastoviscoplastic constitutive relations formulated in terms of the actual and unloaded configurations for crystallites]. *Fizicheskaya mezomekhanika [Physical Mesomechanics]*. 2016. Vol. 19. No 5. P. 48–57 (In Russian).

33. Shermergor T.D. *Teoriya uprugosti mikroneodnorodnykh sred [The Theory of Elasticity of Microinhomogeneous Media]*. Moscow. Nauka Publ. 1977. 400 p. (In Russian).

34. Shveykin A.I., Sharifullina E.R. Analiz konstitutivnykh sootnosheniy dlya opisaniya vnutrizerennogo dislokatsionnogo skol'zheniya v ramkakh dvukhurovnevoy uprugoviyazkoplavicheskoy modeli GTsK-polikristallov [Analysis of constitutive relations for the description of intragrain dislocation sliding within the framework of a two-level elastoviscoplastic model of FCC polycrystals]. *Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo universiteta [Bulletin of Tambov State University]*. 2013. Vol. 18. Iss. 4. P. 1665–1666 (In Russian).

MULTILEVEL MODELS OF POLYCRYSTALLINE METALS: COMPARISON OF CONSTITUTIVE RELATIONS FOR CRYSTALLITES

Shveykin A.I.

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

Different formulations of geometrically nonlinear elasticviscoplastic constitutive relations for the mesolevel (the level of an individual crystallite), which are a key element of multilevel models of polycrystalline metals and alloys, are given and compared; various elastic relationships are used to determine the stresses. The most popular relations in finite form in the unloaded configuration, the relations in finite form using the motion decomposition with an explicit separation of the moving coordinate system motion, equivalent to the last constitutive relations in the rate form, as well as their linear approximation, and the relations in the rate form in the current configuration are considered. The estimations are given showing the equivalence or proximity of the stresses determined in the considered formulations with the same kinematic impacts. The results of numerical calculations carried out for randomly chosen kinematic impacts confirm the above conclusions about the similarity of mesolevel model formulations. It is noted that the formulation using the motion decomposition with an explicit separation of the moving coordinate system motion allows theoretically justified to go to the close formulation in the rate form in the current configuration, which is preferable for the numerical solution of boundary value problems with varying contact conditions (necessary for modeling of thermomechanical processing technological processes).

Keywords: multilevel models of polycrystals, large deformations, constitutive relations, internal variables, elastoviscoplasticity.