

УДК 539.3

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРЫ ГЦК-, ОЦК- И ГПУ-ПОЛИКРИСТАЛЛОВ ПРИ НЕУПРУГОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ

© 2011 г.

*А.И. Швейкин, О.В. Бразгина, Н.С. Кондратьев*

Пермский государственный технический университет

alexsh59@bk.ru

Поступила в редакцию 15.06.2011

Для описания процессов глубокого пластического деформирования поликристаллических материалов, сопровождающихся эволюцией внутренней структуры, предлагается двухуровневая (макро- и мезоуровни) конститутивная модель. Моделирование процессов деформирования на макроуровне осуществляется с применением конститутивных соотношений, основанных на введении внутренних переменных, определяемых из модели мезоуровня. При анализе эволюции внутренних переменных учитывается широкий спектр механизмов неупругого деформирования: внутризеренное и зернограничное скольжение, влияние температуры, двойникование, ротации кристаллической решетки зерен, фрагментация и дробления. Результаты моделирования, в том числе характеристики эволюционирующей структуры, согласуются с опытными данными.

*Ключевые слова:* эволюция внутренней структуры, неупругое деформирование, многоуровневое моделирование, внутренние переменные.

### Общая структура двухуровневой модели

Физико-механические свойства поликристаллических материалов определяются внутренней микроструктурой, которая существенно эволюционирует (меняется зеренная и дислокационная структура, происходят ротации решеток кристаллитов) в процессах обработки интенсивным пластическим деформированием. Последние широко используются для получения материалов с уникальными свойствами: субмикрокристаллических, нанокристаллических, текстурированных, способных к сверхпластическим деформациям материалов. Корректное описание эволюционирующей структуры материала дает возможность оптимизировать существующие и разрабатывать новые методы получения материалов с повышенными эксплуатационными характеристиками.

В настоящее время при построении моделей, способных учитывать эволюцию структуры материалов, все большее признание находит подход, основанный на явном введении в структуру определяющих соотношений параметров, отражающих состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры, и формулировке эволюционных (кинетических) уравнений для этих параметров, называемых внутренними переменными, являющихся носителями информации об истории воздействий [1]. Преимущество данного подхода (по сравнению с формулировкой макрофеноменологических определяющих соотношений в операторной форме) –

это возможность построения многоуровневых моделей с явным учетом структуры различных масштабных уровней. В частности, в последние 20 лет весьма интенсивно развиваются построенные в рамках данного подхода так называемые физические теории пластичности [2], явно рассматривающие физические механизмы неупругого деформирования на низших масштабных уровнях.

В настоящем исследовании предлагаются двухуровневые (макро- и мезоуровни) конститутивные модели деформирования поликристаллических металлов с различным типом решетки [3]. На макроуровне в качестве геометрически нелинейного определяющего соотношения используется закон Гука в скоростной форме:

$$\begin{aligned} \Sigma^r &= C : (D - D^{in}), \\ \dot{\Sigma} &= \Omega \cdot \Sigma - \Sigma \cdot \Omega - C : (D - D^{in}), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\Sigma$  – тензор напряжений Коши,  $C$  – тензор модулей упругости,  $D$ ,  $D^{in}$  – тензор деформации скорости и его неупругая составляющая, индекс « $r$ » означает коротационную производную,  $\Omega$  – определяемый спин подвижной системы координат, относительно которой происходит собственно деформационное движение. Неупругая составляющая деформации скорости  $D^{in}$  и эффективные анизотропные упругие свойства  $C$  являются явными внутренними переменными модели макроуровня, в каждый момент деформирования зависят от структуры на низших масштабных уровнях (а через нее – от истории нагружения), определяются

путем осреднения соответствующих характеристик модели мезоуровня, относимой к классу статистических физических моделей пластичности [2].

На мезоуровне (уровне зерен, субзерен) в качестве определяющего соотношения для каждого кристаллита выступает также закон Гука в скоростной форме, при этом учитывается анизотропия кристаллической решетки:

$$\sigma^r = c : d^e = c : (d - d^{in}), \quad (2)$$

$$\sigma^r = \dot{\sigma} - w \cdot \sigma + \sigma \cdot w,$$

где  $\sigma$  – тензор напряжений Коши,  $c$  – тензор четвертого ранга упругих свойств кристалла,  $d$ ,  $d^e$ ,  $d^{in}$  – тензор деформации скорости, его упругая и неупругая составляющие. В соотношении (2) учитывается геометрическая нелинейность: квазитвердое движение связывается с поворотом решетки, в коротационной производной тензора напряжений Коши  $\sigma^r$  фигурирует тензор спина  $w$ , характеризующий скорость вращения кристаллической решетки. Для связи между масштабными уровнями модели применяется гипотеза Фойгта, согласно которой тензоры деформации скорости для зерен совпадают с тензором деформации скорости на макроуровне  $d = D$ . Условие согласования напряженно-деформированного состояния

$$C = \langle c \rangle, \quad \Sigma = \langle \sigma \rangle, \quad D = \langle d \rangle \quad (3)$$

и определяющих соотношений различных масштабных уровней приводит к конкретизации вида коротационной производной на макроуровне

$$\Omega = \langle w \rangle + \Sigma^{-1} \cdot \langle \sigma' \cdot w' \rangle, \quad (4)$$

а также к связи неупругих составляющих скорости деформации

$$D^{in} = \langle d^{in} \rangle + C^{-1} : \langle c' : d^{in'} \rangle. \quad (5)$$

В соотношениях (3)–(5)  $\langle \cdot \rangle$  – оператор осреднения, штрихом ( $\cdot$ ) обозначено отклонение соответствующей величины для кристаллита от средних по представительному объему макроуровня, например,  $c = \langle c \rangle + c'$ .

### Краткое описание моделей мезоуровня

В моделях мезоуровня при определении скоростей неупругих деформаций  $d^{in}$  учитывается вязкопластическое скольжение дислокаций по внутризеренным системам скольжения и зернограницное проскальзывание (с учетом температуры). Для учета последнего на каждой границе по текущим напряжениям определяется наиболее вероятное направление проскальзывания; для определения скорости сдвига и эволюции соответствующих критических напряжений построе-

ны соответствующие эволюционные уравнения. При моделировании ГПУ- и ОЦК-металлов при определении  $d^{in}$  помимо вышеперечисленных механизмов учитывается двойникование, которое также связывается со сдвиговыми процессами и рассматривается как процесс «псевдоскольжения».

Дано описание эволюции ориентаций решеток зерен с учетом несовместности скольжения дислокаций в соседних зернах, для чего вводится еще одна внутренняя переменная – действующее на зерно моментное напряжение  $\mu$ , эволюция которого связывается с разностью пластических составляющих градиента скорости соседних зерен. Спин решетки  $w$  связывается с моментными напряжениями соотношениями, формально аналогичными соотношениям теории пластического течения. Подмодель позволяет описать эволюцию функции распределения ориентаций решеток кристаллитов, в том числе – текстурообразование, и эволюцию анизотропных свойств на макроуровне. Предлагается модель для описания фрагментации зерен; с учетом действующих на зерно напряжений и моментных напряжений построен критерий дробления зерен, геометрия после дробления определяется на основе минимизации повышения упругой энергии окружения дробящегося зерна. Данные подмодели позволяют описать эволюцию зеренной структуры (среднего размера зерна).

Разработаны алгоритмы реализации ряда двухуровневых моделей для случая произвольного нагружения. Рассмотрены некоторые процессы обработки материалов (осадка, стесненная осадка, равноканальное угловое прессование); результаты моделирования, в том числе характеристики эволюционирующей структуры, согласуются с опытными данными.

Работа выполнена под руководством профессора, д.ф.-м.н. П.В. Трусова, в разработке алгоритмов и программ приняли участие сотрудники Пермского государственного технического университета В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.Ю. Янц.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №10-08-96010-р\_урал\_а, 10-08-00156-а).*

### Список литературы

1. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры // Физическая мезомеханика. 2009. Т. 12, №3. С. 61–71.
2. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использова-

нием физической теории упругопластичности // Физическая мезомеханика. 2010. Т. 13, №3. С. 21–30.

3. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформи-

рования поликристаллических материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. 2009.

Т. 15, №3. С. 327–344.

## MODELLING THE EVOLUTION OF THE STRUCTURE OF FCC-, BCC- AND HCP-POLYCRYSTALS UNDER INELASTIC DEFORMATION

*A.I. Shveykin, O.V. Brazgina, N.S. Kondratyev*

A two-level (macro- and meso-) constitutive model is presented to describe processes of finite inelastic deformation of polycrystalline materials accompanied by the evolution of the internal structure. The deformation processes at the macro level are modeled using the constitutive relations based on the introduction of internal variables defined by the model of meso-level. When analyzing the evolution of internal variables, a wide range of inelastic deformation mechanisms is considered: crystal plasticity and grain-boundary sliding, temperature effects, twinning, rotation of the crystalline lattices, fragmentation and shattering of grains. Modeling results, including the characteristics of the evolving structure, agree with experimental data.

*Keywords:* evolution of internal structure, inelastic deformation, multilevel modelling, internal variables.