УДК 539.3

Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах

П.В. Трусов, П.С. Волегов

Пермский государственный технический университет, Пермь, 614000, Россия

Кратко рассмотрена структура определяющих соотношений, основанных на введении внутренних переменных; для определения внутренних переменных макроуровня необходимо привлечение модели мезоуровня. В качестве последней в работе принята одна из физических теорий пластичности (модель Линя). Весьма важным параметром этой физической теории является критическое напряжение сдвига по системам скольжения. Предлагаются эволюционные уравнения для критического напряжения, учитывающие аннигиляцию дислокаций и дислокационные реакции с образованием прочных препятствий (барьеров Ломера–Коттрелла), что позволяет описывать эффект Баушингера и дополнительное упрочнение при сложном нагружении. Возможности модели демонстрируются результатами численных экспериментов по монотонному и циклическому одноосному нагружению поликристаллов.

Ключевые слова: определяющие соотношения, внутренние переменные, эволюция микроструктуры, закон упрочнения, барьеры Ломера–Коттрелла, эффект Баушингера

Internal variable constitutive models and their application to description of hardening in single crystals

P.V. Trusov and P.S. Volegov

Perm State Technical University, Perm, 614000, Russia

The paper briefly considers the structure of internal variable constitutive models; determination of macroscale internal variables requires application of a mesoscale model. The mesoscale model is taken to be one of the physical theories of plasticity (Lin's model), in which critical shear stress along slip systems is of crucial importance. In this work, evolution equations for critical shear stress that take into account dislocation annihilation and reactions with the formation of Lomer–Cottrell barriers are proposed thus making possible description of the Bauschinger effect and additional hardening under complex loading. The potentialities of the model are demonstrated by numerical results of monotonic and cyclic uniaxial loading of polycrystals.

Keywords: constitutive model, internal variables, microstructure evolution, hardening law, Lomer–Cottrell barriers, Bauschinger effect

1. Введение

Известно, что существенную роль в физических теориях пластичности играют так называемые законы упрочнения, т.е. соотношения, связывающие критическое сдвиговое напряжение систем скольжения с некоторым набором параметров (сдвигами, температурой, энергией дефекта упаковки и т.д.). Эти законы по сути своей отражают эволюцию мезо- и микроструктуры материала, а точнее, эволюцию дефектной структуры при упругопластическом деформировании, в первую очередь, изменения в дислокационной структуре деформируемого материала. Изменение вида законов упрочнения (и значений входящих в него материальных констант) существенным образом влияет на результаты моделирования, поэтому в этих соотношениях важно учитывать по возможности большее число механизмов неупругого деформирования (существенных для исследуемого процесса) на микроуровне.

Таким образом, основной целью предлагаемой работы является построение и анализ законов упрочнения при упругопластической деформации монокристалла, учитывающих эволюцию его микроструктуры. При

© Трусов П.В., Волегов П.С., 2009

этом важно, чтобы полученные соотношения содержали в себе (за исключением, может быть, нескольких констант материала) только переменные мезо- или макроуровня, чтобы не усложнять процедуры идентификации и верификации модели. Вообще говоря, возможны два варианта построения таких соотношений: в первом случае в соотношения для предела текучести (или скорости предела текучести) необходимо будет внести некоторые операторы над историей деформирования без использования переменных, описывающих собственно эволюцию мезо- и микроструктуры материала. Во втором случае необходимо явным образом (используя соответствующую методологию) ввести в рассмотрение параметры, описывающие эволюцию мезо- и микроструктуры, и сформулировать для них эволюционные уравнения. Исходя из целей настоящего исследования, предпочтительным представляется именно второй подход, позволяющий (кроме существенного упрощения математических соотношений) достаточно прозрачным образом учитывать физику взаимодействия носителей рассматриваемых механизмов упрочнения. Переменные, количественно описывающие свойства таких носителей, называют внутренними переменными, а подход к формулированию определяющих соотношений — методом построения определяющих соотношений с использованием внутренних переменных [1, 2]. Ниже будет показано, что внутренними переменными в данной работе будут выступать плотности дислокаций (на микроуровне) и накопленные сдвиги по системам скольжения (на мезоуровне).

2. Построение определяющих соотношений с использованием внутренних переменных

В литературе, посвященной различным теориям процессов необратимого деформирования, внутренними переменными называют параметры, отражающие структуру и механизмы деформирования на мезо- и микроуровнях. Этимология термина «внутренние переменные», вероятно, связана и с (неравновесной) термодинамикой, где внутренними переменными называют параметры состояния термодинамической системы, управлять напрямую изменением которых за счет внешних воздействий невозможно. Иначе говоря, эти переменные описывают «внутреннюю жизнь» термодинамической системы, чрезвычайно богатую сценариями развития, неустойчивостями, возникновением и разрушением внутренних структур.

Следует отметить, что в настоящее время невозможно назвать какую-либо теорию необратимых деформаций, не использующую явно или неявно внутренние переменные. Например, в классической теории пластичности широко применяется понятие поверхности текучести, отделяющее в пространстве напряжений (или деформаций) области упругого и неупругого деформирования. В процессе деформирования поверхность текучести изменяет свою форму и размеры, перемещается как целое. Эта эволюция поверхности текучести на макроуровне отражает изменения свойств материала, обусловленные перестройками мезо- и микроструктуры, в связи с чем параметры, описывающие эволюцию этой поверхности, с полным правом можно отнести к внутренним переменным.

Однако теории, использующие внутренние переменные неявным образом, как уже отмечено выше, записываются в весьма сложной форме, в общем случае в форме операторных уравнений, учитывающих память материала о предшествующей истории воздействий. Идентификация и применение подобных моделей требует проведения трудоемких и дорогостоящих экспериментов. В связи с этим большинство исследователей при постановке конкретных задач отказываются от применения более точных (но и более сложных) теорий (например теории упругопластических процессов А.А. Ильюшина [3]) в пользу более простых теорий, например деформационной теории пластичности или теории пластического течения. Однако при переходе к этим простым определяющим соотношениям из рассмотрения исключается одно из важнейших (особенно в необратимых процессах) свойств материалов — свойство памяти.

Возникает вопрос: можно ли, сохранив свойство памяти материала, сформулировать определяющие соотношения для его описания в достаточно простой форме (тензорно-алгебраической или в виде простейшего, например дифференциального, оператора)? Ответ на этот вопрос, на наш взгляд, является положительным с учетом введенного выше понятия внутренних переменных и вкладываемого в него физического смысла. Представляется физически обоснованным принять следующую гипотезу [2].

Реакция материала в каждый момент времени полностью определяется значениями тензорных термомеханических характеристик материала, конечного набора внутренних переменных, параметров физико-механических воздействий и их производных по времени требуемого порядка в исследуемый момент времени.

Стоит отметить, что в этом случае история воздействий не отбрасывается, ее «носителями» будут являться введенные внутренние переменные.

Ниже приведена общая структура определяющих соотношений с использованием внутренних переменных.

Обозначим через $\boldsymbol{\Sigma}$ меру (в общем случае произвольную) напряженного состояния, $\overset{\mathrm{r}}{\boldsymbol{\Sigma}}$ — ее объективную скорость [4] изменения, $\mathbf{P}_\gamma$, $\gamma = \overline{1,\Gamma}$ — параметры воздействия термомеханической (например температура, мера деформированного состояния и т.д.) и нетермомеханической (например радиация, химические воздействия) природы.

Часть внутренних переменных непосредственно входит в структуру определяющих соотношений данного

масштабного уровня, такие переменные в дальнейшем будем обозначать $\mathbf{J}^{\mathrm{e}}_{\beta}$, $\beta = \overline{1,\mathrm{B}^{\mathrm{e}}}$, и называть их внутренними «явными» переменными. Вторая группа внутренних переменных (в большинстве случаев относящихся к более глубоким масштабным уровням) входит в качестве переменных в эволюционные уравнения. Переменные этой группы будем обозначать как $\mathbf{J}^{\mathrm{i}}_{\beta}$, $\beta = \overline{1,\mathrm{B}^{\mathrm{i}}}$; чтобы отличать их от переменных первой группы, будем называть их внутренними «скрытыми (неявными)» переменными. Полная совокупность внутренних переменных, таким образом, определяется как $\{\mathbf{J}_{\beta}\} = \{\mathbf{J}^{\mathrm{e}}_{\gamma}, \mathbf{J}^{\mathrm{i}}_{\delta}\}$, $\beta = \overline{1,\mathrm{B}}$, $\gamma = \overline{1,\mathrm{B}^{\mathrm{e}}}$, $\delta = \overline{1,\mathrm{B}^{\mathrm{i}}}$, $\mathrm{B} = \mathrm{B}^{\mathrm{e}} + \mathrm{B}^{\mathrm{i}}$.

Структура определяющих соотношений с внутренними переменными включает в себя совокупность следующих групп соотношений:

– уравнения состояния (физические уравнения):

$$\mathbf{\Sigma}^{\mathrm{r}} = \mathbf{F}_{\mathrm{r}}(\mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{J}^{\mathrm{e}}_{\gamma}), \tag{1}$$

– эволюционные уравнения (для скрытых внутренних переменных):

$$\mathbf{J}^{\mathrm{ir}}_{\delta} = \mathbf{R}_{\mathrm{r}\delta}(\mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{J}^{\mathrm{i}}_{\beta}), \tag{2}$$

– замыкающие уравнения:

$$\mathbf{J}^{\mathrm{er}}_{\gamma} = \mathbf{C}_{\mathrm{r}\gamma}(\mathbf{P}_{\alpha}, \mathbf{J}^{\mathrm{i}}_{\delta}), \tag{3}$$

где верхний индекс r обозначает ту или иную независящую от выбора системы отсчета производную (как правило, коротационную [4]).

Можно отметить, что данный подход имеет определенные преимущества по сравнению с формулировкой определяющих соотношений в операторной форме: бóльшая ясность физической интерпретации уравнений, возможность прямой или косвенной проверки результатов анализа эволюции мезо- и микроструктуры на основании опытных данных и/или анализа микропараметров, модели данного типа обладают значительной универсальностью. Предлагаемый общий вид определяющих соотношений (1)–(3) представляется более удобным для последующего анализа и приложений, чем запись определяющих соотношений в операторной форме, так как могут быть использованы хорошо разработанные в тензорном анализе теория тензорных функций тензорных аргументов, теория инвариантов и другие разделы.

3. Общий вид закона упрочнения

В работах [1, 2] для определения параметров напряженно-деформированного состояния каждого из зерен используется физическая теория пластичности, основанная на модели Линя [5]. Для исключения из задачи неоднозначностей число систем скольжения удвоено (для ГЦК-кристаллов таким образом число систем скольжения равно 24). Одним из основных соотношений модели, равно как и моделей типа Тейлора–Бишопа–Хилла, является закон Шмида, согласно которому скольжение в произвольной системе скольжения может иметь место при достижении в ней действующим касательным напряжением значения критического сдвигового напряжения. В оригинальной модели Линя упрочнение (изменение критического сдвигового напряжения) по системам скольжения считается изотропным и зависящим от суммарного сдвига (далее соотношения для законов упрочнения будем записывать в скоростях):

$$\dot{\tau}^{(k)}_{\mathrm{c}} = f\left(\sum_{i=1}^{24} \dot{\gamma}^{\mathrm{p}(i)}\right), \; k = \overline{1,24}. \tag{4}$$

Вообще говоря, можно рассматривать и неизотропное (но линейное относительно скоростей пластических сдвигов $\dot{\gamma}^{\mathrm{p}(i)}$) упрочнение:

$$\dot{\tau}^{(k)}_{\mathrm{c}} = E\sum_{i=1}^{24} a^{(k)}_i \dot{\gamma}^{\mathrm{p}(i)}, \; k = \overline{1,24}, \; \dot{\gamma}^{\mathrm{p}(i)} \geq 0, \tag{5}$$
$$\tau^{(k)}_{\mathrm{c}}(0) = \tau^{(k)}_{\mathrm{c}0},$$

где $\tau^{(k)}_{\mathrm{c}0}$ — начальный предел текучести в k-й системе скольжения; E — модуль Юнга; $a^{(k)}_i$ — матрица (безразмерных) коэффициентов упрочнения, причем ее диагональные члены $a^{(i)}_i$ описывают деформационное упрочнение, а недиагональные $a^{(k)}_i = a^{(i)}_k$ $(i \neq k)$ — латентное.

Интересным также представляется рассмотрение степенного закона упрочнения:

$$\dot{\tau}^{(k)}_{\mathrm{c}} = \psi \dot{\gamma}^{\mathrm{p}(k)} \left(E\sum_{i=1}^{24} a_i \dot{\gamma}^{\mathrm{p}(i)}\right)^{\psi-1}, \; k = \overline{1,24}, \tag{6}$$
$$\psi > 1, \; \dot{\gamma}^{\mathrm{p}(i)} \geq 0, \; \tau^{(k)}_{\mathrm{c}}(0) = \tau^{(k)}_{\mathrm{c}0}.$$

В качестве первого слагаемого закона упрочнения будем использовать соотношение (6). Далее будем дополнять соотношение (6) слагаемыми, учитывающими основные механизмы возникновения препятствий при пластическом деформировании. В связи с тем, что некоторые из эффектов, которые требуется описать, появляются только при рассмотрении объемной задачи, ниже везде подразумевается рассмотрение скольжения дислокаций (краевых и винтовых) в ГЦК-решетке. На данном этапе остановимся на двух механизмах:

1. Аннигиляция дислокаций, имеющих одну плоскость скольжения, но противоположно направленный вектор Бюргерса. Учет в явном виде именно такого механизма взаимодействия дислокаций позволит, на наш взгляд, описать хорошо известный в литературе эффект Баушингера [6]. Исходя из того, что падение предела текучести материала происходит при изменении направления деформирования даже в случае одноосного реверсивного нагружения монокристалла (т.е. и в тех случаях, когда согласно закону Шмида активными являются только системы скольжения с одним и тем же вектором нормали **n**), можно предположить, что уменьшение предела текучести по данной системе скольжения вызвано именно аннигиляцией «застопоренных» на различных препятствиях при предваритель-

ной деформации дислокаций, которые при реверсивной деформации, взаимодействуя упругими полями напряжений, движутся облегченно (т.к. в обратном направлении скоплений дислокаций того же знака для них не существует).

2. Взаимодействие расщепленных дислокаций, которые, по сути, являются совокупностью дефекта упаковки и двух частичных дислокаций, представляющих собой линии, отделяющие область дефекта упаковки от области идеального кристалла. Известно, что такое взаимодействие может привести к появлению так называемых барьеров Ломера–Коттрелла, затрудняющих движение дислокаций.

Таким образом, будем искать общий вид закона упрочнения для каждой из систем скольжения в скоростной форме:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = f\left(\sum_{i=1}^{24}\dot{\gamma}^{p(i)}\right) + f_{\text{расщ}}(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n) + \\ + f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m), k = \overline{1, 24}, \qquad (7)$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ и $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m$ — наборы внутренних переменных, характеризующих соответствующие механизмы.

Вообще говоря, каждое из трех слагаемых отражает эволюции дислокационных структур зерна, но каждому из слагаемых поставлен в соответствие отдельный механизм пластической деформации. Так, в первом члене $f\left(\sum_{i=1}^{24}\dot{\gamma}^{p(i)}\right)$ учитывается «чистое» скольжение дислокаций и их взаимодействие с препятствиями по своим системам скольжения. Поэтому первое слагаемое дает упрочнение при любых ненулевых сдвигах по любым системам скольжения. Возрастание предела текучести здесь объясняется наличием в зерне различного рода препятствий, таких как примесные атомы, барьеры, границы зерен, а также взаимодействием дислокаций различных систем скольжения близко- и дальнодействующими полями напряжений. Слагаемое $f_{\text{расщ}}(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ описывает взаимодействие расщепленных дислокаций, в результате которого могут «выключаться» из скольжения отдельные плоскости систем скольжения (и вследствие этого расти предел текучести). При этом движение расщепленных дислокаций и упрочнение за счет других видов взаимодействия в кристалле учитываются в первом слагаемом. Что касается слагаемого $f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$, то здесь учитывается уменьшение количества дислокаций (а следовательно, и плотности дислокаций) в той или иной паре систем скольжения вследствие их аннигиляции (в том числе и аннигиляции расщепленных дислокаций) при скольжении, поэтому в соотношение для $f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$ тем или иным образом должны входить сдвиги (скорости сдвигов) по системам скольжения. В связи с тем, что упрочнение при движении и взаимодействие дислокаций с различными препятствиями уже учитывается в первом слагаемом, слагаемое $f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$ должно давать при реверсивном нагружении разупрочнение, уменьшающее упрочнение за счет первого члена.

Задача теперь состоит в подборе таких групп внутренних переменных $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n$ и $\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m$, с помощью которых можно (наиболее просто) описывать интересующие нас механизмы деформирования.

4. Образование барьеров Ломера–Коттрелла и их влияние на упрочнение

Определим возможные параметры и константы, которые могут войти в функцию $f_{\text{расщ}}(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$. Известно [7, 8], что ширина расщепленных дислокаций тем выше, чем меньше энергия дефекта упаковки $\gamma_{\text{ЭДУ}}$, которая, в свою очередь, существенным образом зависит не только от материала, но и от способа его получения. У материалов с низким значением $\gamma_{\text{ЭДУ}}$ расщепленные дислокации имеют большую ширину (от 3 до 20 межатомных расстояний — данные для Au и Cu), поэтому случаи стягивания расщепленной дислокации в полную достаточно редки, и поперечное скольжение расщепленных дислокаций в материалах с низким значением $\gamma_{\text{ЭДУ}}$ крайне затруднено [7, 8]. Известно также, что при скольжении по двум непараллельным пересекающимся плоскостям скольжения две расщепленные дислокации могут образовать сидячую дислокацию (или барьер Ломера–Коттрелла), заблокировав таким образом движение дислокаций по плоскостям залегания провзаимодействовавших дислокаций. Системы скольжения, расщепленные дислокации которых могут взаимодействовать с образованием барьеров Ломера–Коттрелла, будем называть сопряженными. По результатам анализа, существенными на данном этапе для нас являются такие параметры, как ширина расщепленных дислокаций (или энергия дефекта упаковки $\gamma_{\text{ЭДУ}}$), количество атомных слоев, которые «выключаются» из процесса пластического скольжения в результате взаимодействия данной расщепленной дислокации с другими дислокациями (или, что то же самое, плотность уже накопленных к данному моменту дислокационных барьеров), и скорость сдвига в системах скольжения, плоскости которых пересекают данную (как мера движения дислокаций). Тогда функцию $f_{\text{расщ}}(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ можно определить в следующем виде:

$$f_{\text{расщ}}^{(i)}(\gamma_{\text{ЭДУ}}, \gamma^{p(j)}, \dot{\gamma}^{p(i)}) = \\ = \xi_1 \tau_c^{(i)}\left(1 - \frac{\gamma_{\text{ЭДУ}}}{\gamma_{\text{ЭДУ}}^*}\right) H\left(1 - \frac{\gamma_{\text{ЭДУ}}}{\gamma_{\text{ЭДУ}}^*}\right) \times \\ \times \left(\int_0^t f_{\text{расщ}}^{(i)} d\tau + f_0^{(i)}\right)^{-1} \dot{\gamma}^{p(i)}\left(\sum_{j\neq i}^{N^*}\gamma^{p(j)} + \gamma_0\right), \qquad (8)$$

где $\gamma^*_{\text{ЭДУ}}$ — минимальная энергия дефекта упаковки, при которой вышеизложенный механизм можно не учитывать, $\gamma_{\text{ЭДУ}} < \gamma^*_{\text{ЭДУ}}$; $H(1-\gamma_{\text{ЭДУ}}/\gamma^*_{\text{ЭДУ}})$ — функция Хэвисайда; N^* — число систем скольжения, сопряженных к данной; $\tau_c^{(i)}$ — текущий предел текучести в данной системе скольжения, определяемый первым слагаемым (8); γ_0 — некоторая малая константа, смысл которой поясним ниже; ξ_1 — материальная константа.

Для величины ξ_1 сделаем попытку провести краткий анализ с целью упрощения дальнейшей идентификации этой константы. Исходя из проверки на размерность, $[\xi_1]$ = Па, можно предположить, что ξ_1 по своему физическому смыслу есть дополнительный параметр материала, отвечающий за различную скорость повышения критического сдвигового напряжения у разных материалов при одинаковых условиях нагружения, т.е. ξ_1 можно назвать модулем дополнительного упрочнения. Вопрос о том, является ли ξ_1 материальной константой или материальной функцией, остается на данный момент открытым, т.к. исходя из физического смысла рассматриваемого процесса модуль ξ_1 должен быть материальной функцией, однако чтобы не усложнять модель, на данном этапе принято, что ξ_1 = const. В первом приближении можно считать, что ξ_1 имеет смысл удельной энергии активации разрушения дислокационных барьеров.

Соотношение (8) строится исходя из следующих предположений. Во-первых, необходимо учитывать общее количество уже имеющихся в материале в состоянии поставки расщепленных дислокаций (т.е., по сути, учесть количество уже имеющихся на начальный момент деформирования свободных расщепленных дислокаций, образованных, например, в результате действия собственных полей напряжений в материале либо флуктуаций температуры и «готовых» к реакциям образования дислокационных барьеров с вновь образующимися дислокациями). Во-вторых, необходимо учесть динамику накопления расщепленных дислокаций в сопряженных системах скольжения. В связи с тем, что строится соотношение для скорости упрочнения, для учета количества расщепленных дислокаций, способных образовывать барьеры Ломера–Коттрелла в системе скольжения, будем использовать скорость сдвига в данной системе скольжения, т.к. скорость сдвига и дает возможность характеризовать движение свободных (в том числе и зарождающихся) дислокаций в рассматриваемой системе. Для учета же количества расщепленных дислокаций, с которыми могут прореагировать движущиеся дислокации данной системы скольжения, будем использовать накопленный сдвиг в сопряженных системах. Введение в соотношение (8) малого слагаемого γ_0 объясняется необходимостью учета факта наличия в исходном материале дислокаций некоторой плотности [9]. Кроме того, в первом множителе нужно отобразить не полное количество образующихся в ходе деформирования расщепленных дислокаций, а только ту их часть, которая еще не образовала барьеров Ломера–Коттрелла; представляется возможным учесть данный факт за счет введения в знаменатель соотношения (8) «истории» накопления барьеров Ломера–Коттрелла при помощи множителя

$$\tau_c^{(i)}\left(\int_\tau^t f_{\text{расщ}}^{(i)}\mathrm{d}\tau + f_0^{(i)}\right)^{-1}.$$

Обоснованием такого предположения может служить то, что интеграл от функции скорости упрочнения характеризует плотность накопленных на данный момент деформирования барьеров, с ростом которой, в свою очередь, уменьшается длина свободного пробега дислокаций, а следовательно, и интенсивность образования новых барьеров. Величина $f_0^{(i)}$ в соотношении несет смысл плотности существующих в недеформированном материале барьеров: $f_0^{(i)} = f_0^{(i)}(\tau_{c0}^{(i)})$.

5. Описание эффекта Баушингера: аннигиляция дислокаций

При активизации источников дислокаций в произвольной фиксированной плоскости возникают петли дислокаций, которые расширяются до тех пор, пока не встретятся с сильными препятствиями. Противоположные части петель образованы дислокациями различных знаков. При последующем реверсивном нагружении эти противоположные части петель дислокаций взаимодействуют своими дальнодействующими полями, при сближении их происходит аннигиляция этих сегментов, что должно привести к снижению предела текучести в данных двух системах скольжения (с одним и тем же вектором нормали).

Рассмотрим следующий подход к построению соотношения для $f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$. Для системы скольжения i будем рассматривать скорость сдвига $\dot\gamma^{\text{p}(i)}$, а для противоположной системы скольжения накопленный сдвиг $\gamma^{\text{p}(i+12)}$, номер системы скольжения взят по модулю 12. Тогда можно сделать предположение, что приращение предела текучести в системе скольжения обусловлено как движением мобильных дислокаций по данной системе скольжения, так и наличием в противоположной системе скольжения дислокаций противоположного им знака. Кроме того необходимо учесть и «историю» деформирования по данной активной системе скольжения, в силу того что в процессе деформирования в данной системе произошли изменения дефектной структуры, затрудняющие свободное движение дислокаций, а также тот факт, что даже в состоянии поставки в противоположной системе скольжения имеются в наличии дислокации, способные к аннигиляции. Тогда соотношение для $f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$ можно записать в виде:

$$f_{\text{ан}}(\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m) = \frac{\mathrm{d}\tau_{\text{ан}}^{(i)}}{\mathrm{d}t} =$$

$$= -\tau_{\text{ан}}^{(i)} \frac{\gamma^{\text{p}(i)}}{\sum\limits_j \gamma^{\text{p}(j)}} \dot{\gamma}^{\text{p}(i)} (\gamma^{\text{p}(i+12)} + \gamma_0),$$

$$\tau_{\text{ан}}^{(i)}\Big|_{t=0} = \tau_{\text{c0}}^{(i)}, \qquad (9)$$

где $\sum\limits_j \gamma^{\text{p}(j)}$ — суммарный накопленный сдвиг по всем системам скольжения; γ_0 — малый параметр (см. соотношение (8)).

6. Результаты работы. Выводы

В работах [1, 2] предложена модель эволюции микроструктуры материала с учетом ротационных мод пластичности, позволяющая в том числе описывать образование текстуры в образце в различных процессах обработки металлов давлением. В цитируемых работах рассматривается изотермическая пластическая деформация представительного объема однофазного поликристалла. Для упрощения реализации модели все зерна принимаются одинакового размера и формы, число соседей у всех одинаково и неизменно. Представительный объем макроуровня считается состоящим из конечного числа *M* материальных точек, под которыми понимаются зерна поликристалла. Для простоты и уменьшения вычислительных затрат рассмотрен плоский случай.

К входным параметрам модели относятся начальное распределение углов $\varphi^{(m)}$, задающих ориентацию кристаллографических систем зерен в лабораторной системе координат (в простейшем случае — случайное равномерное распределение), размер зерна *d*, история нагружения, время *t* (или параметр нагружения). Выходные параметры — текущие распределение ориентаций кристаллографических систем зерен (функция распределения ориентаций), а также значения компонент тензоров деформаций и напряжений на уровне представительного макрообъема. Для определения параметров напряженно-деформированного состояния в каждом зерне в процессе упругопластической деформации используется физическая теория — модель Линя [5], в соответствии с которой для представительного объема принимается гипотеза Фойгта (для полных скоростей деформаций), напряжения на макроуровне определяются путем осреднения по объему.

Проведена серия численных экспериментов с использованием модели с законами упрочнения в виде (8), (9), получены результаты, часть из которых приведена ниже.

На рис. 1 приведен фрагмент моделируемой области поликристалла. Шестиугольниками показаны зерна поликристаллического агрегата, треугольниками — взаимное расположение систем скольжения. В начальный момент принят случайный равномерный закон распределения ориентаций зерен. Представительный объем испытывает деформации одноосного сжатия в вертикальном направлении. При этом в соответствии с соотношениями модели [1, 2] рассматриваются повороты зерен в результате несоответствия ориентации систем скольжения произвольного зерна с ориентацией систем скольжения его соседей при пластической деформации. На рис. 2 приведен вид того же фрагмента моделируемой области при достижении интенсивности деформации значения $\varepsilon_{\text{и}} = 0.95$. Из анализа полученной картины можно говорить об образовании текстуры в результате деформации, т.к. имеет место появление выделенного направления кристаллографических систем координат зерен по отношению к оси сжатия. Этот факт подтверждается и приведенными зависимостями среднего угла ориентации зерен $\bar{\varphi}(\varepsilon_{\text{и}})$, а также среднеквадратического отклонения углов ориентации зерен от среднего значения $D(\varepsilon_{\text{и}})$ (рис. 3, 4).

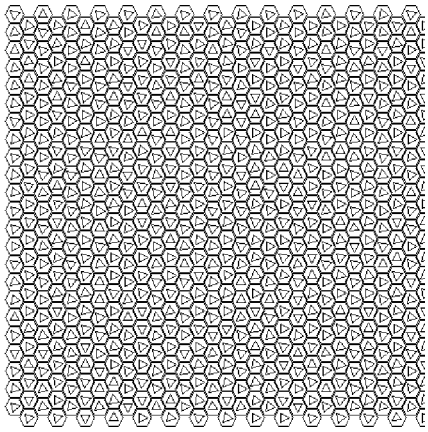


Рис. 1. Фрагмент моделируемой области. Треугольниками показаны системы скольжения

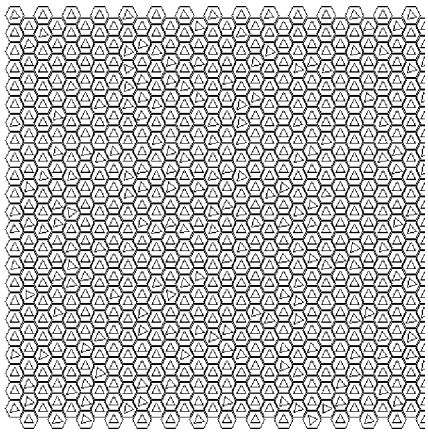


Рис. 2. Фрагмент моделируемой области после деформации

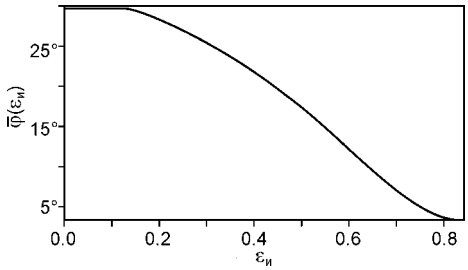


Рис. 3. Зависимость среднего угла ориентации зерен от интенсивности деформаций

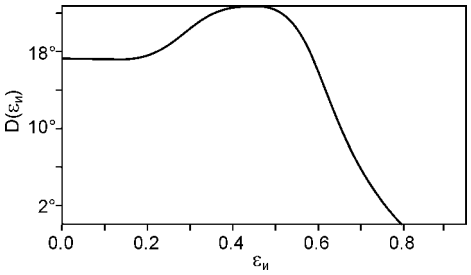


Рис. 4. Зависимость среднеквадратического отклонения угла ориентации зерен от интенсивности деформаций

На приведенных ниже зависимостях напряжение – деформация (рис. 5, 6) отчетливо видно начало второй стадии упрочнения, связанное с введением в законы упрочнения слагаемого, описывающего дополнительное упрочнение за счет реакций на расщепленных дислокациях и образование барьеров Ломера–Коттрелла. Благодаря введению слагаемого вида (8) удалось опи-

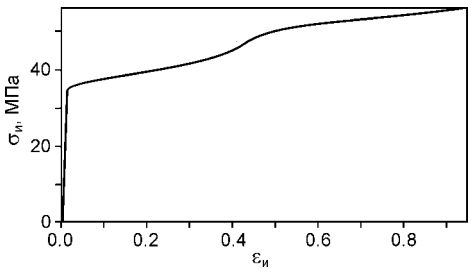


Рис. 5. Зависимость напряжение – деформация при одноосном сжатии поликристаллического агрегата. На рисунке хорошо заметен участок второй стадии упрочнения

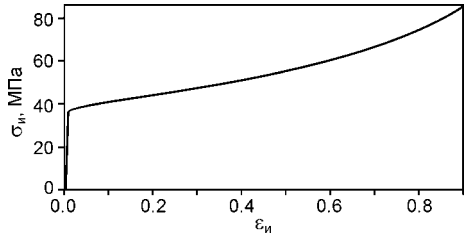


Рис. 6. Зависимость напряжение – деформация при чистом сдвиге поликристаллического агрегата

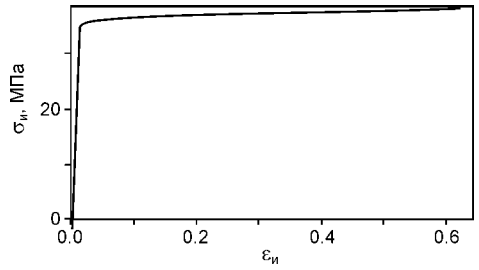


Рис. 7. Зависимость напряжение – деформация при одноосном сжатии поликристаллического агрегата (без учета дополнительных слагаемых)

сать эту стадию упрочнения, причем полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Для сравнения на рис. 7 приведен вид зависимости напряжение – деформация без учета слагаемого, описывающего реакции на расщепленных дислокациях. Отчетливо видно, что участок второй стадии упрочнения отсутствует.

Получены результаты по реверсивному деформированию с учетом слагаемого, описывающего аннигиляцию дислокаций (рис. 8). На диаграмме видно, что при смене направления деформирования (с одноосного сжатия на одноосное растяжение в том же направлении) предел текучести материала снизился с ~22 до ~18 МПа. Кроме того, на рис. 9 показаны результаты работы с учетом всех слагаемых в законе упрочнения вида (7).

Также проведены численные эксперименты по многократному (циклическому) деформированию. Описанный выше представительный объем подвергали кинематическому нагружению вида растяжение-сжатие при различном числе циклов нагружения. На рис. 10 показана диаграмма напряжение – деформация, полученная при 3 циклах нагружения, на рис. 11 — при 6 циклах нагружения. Особо стоит отметить качественные изменения вида зависимостей напряжение – деформация с ростом количества циклов нагружения. С увеличением количества циклов практически исчезает площадка те-

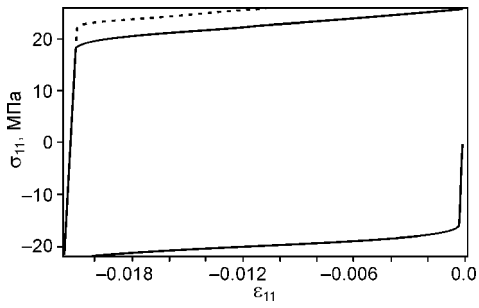


Рис. 8. Зависимость напряжение – деформация при одноосном сжатии и последующем одноосном растяжении поликристаллического агрегата (сплошная линия — с учетом аннигиляции дислокаций, пунктирная — без учета аннигиляции)

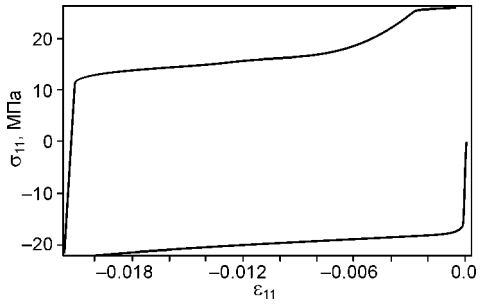


Рис. 9. Зависимость напряжение – деформация при одноосном сжатии и последующем одноосном растяжении поликристаллического агрегата (с учетом аннигиляции дислокаций и реакций на расщепленных дислокациях)

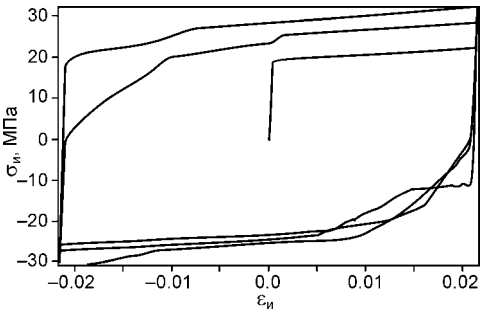


Рис. 10. Зависимость напряжение – деформация при циклическом нагружении поликристаллического агрегата (с учетом аннигиляции дислокаций и реакций на расщепленных дислокациях), 3 цикла нагружения

кучести, пластический участок деформирования начинается при напряжениях, значительно меньших по сравнению с первоначальными, наблюдается явление «размазывания» второй стадии упрочнения по всему участку пластического течения. Исследование изменения дефектной структуры материала при большом накопленном числе циклов нагружения показывает на постепенный выход всех систем скольжения на примерно одинаковую плотность заблокированных плоскостей скольжения (т.е. по сути на одинаковую плотность барьеров Ломера–Коттрелла), этим можно объяснить постепенное сглаживание графика на рис. 11.

Таким образом, в представленной работе делается попытка описать некоторые известные в литературе эффекты упрочнения (на макроуровне) с использованием формализма определяющих соотношений с внутренними переменными и физической теории пластичности. Полученный вид законов упрочнения протестирован с использованием соотношений модели эволюции микроструктуры материала с учетом ротационных мод пластической деформации [1, 2]. Полученные результаты позволяют говорить о достижении цели, а также о хорошем согласовании с экспериментальными данными.

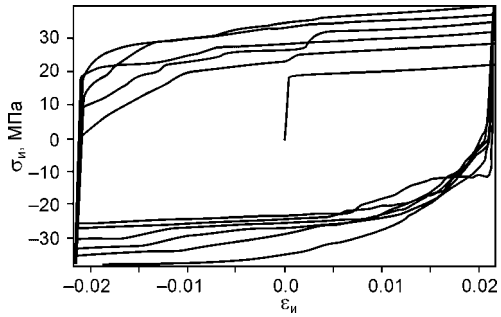


Рис. 11. Зависимость напряжение – деформация при циклическом нагружении поликристаллического агрегата (с учетом аннигиляции дислокаций и реакций на расщепленных дислокациях), 6 циклов нагружения

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 07-08-96025-р_урал_а, 07-08-00352-а).

Литература

1. *Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Трусов П.В.* Конститутивные соотношения с внутренними переменными: общая структура и приложение к текстурообразованию в поликристаллах // Математ. моделир. систем и процессов: Межвуз. сб. науч. тр. / Пермь: ПГТУ, 2006. – № 12. – С. 11–26.
2. *Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Волегов П.С., Швейкин А.И.* О физических теориях пластичности и их применении для описания микроструктуры // Современные проблемы термовязкопластичности: Труды II школы-семинара. – М.: МАМИ, 2007. – С. 128–147.
3. *Ильюшин А.А.* Пластичность. Основы общей математической теории. – М.: Изд-во АН СССР, 1963. – 272 с.
4. *Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И.* Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
5. *Линь Т.Г.* Физическая теория пластичности // Проблемы теории пластичности. Новое в зарубежной механике. Вып. 7. – М.: Мир, 1976. – С. 7–68.
6. *Белл Дж.Ф.* Экспериментальные основы механики деформируемых твердых тел. Ч. 2. Конечные деформации. – М.: Наука, 1984. – 432 с.
7. *Новиков И.И.* Дефекты кристаллического строения металлов. – М.: Металлургия, 1983. – 232 с.
8. *Орлов А.Н.* Введение в теорию дефектов в кристаллах. – М.: Высшая школа, 1983. – 144 с.
9. *Asaro R.J., Needleman A.* Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. – Acta Metall. – 1985. – V. 33. – No. 6. – P. 923–953.

Поступила в редакцию
10.12.2008 г.

Сведения об авторах

Трусов Петр Валентинович, д.ф.-м.н., профессор, зав. каф. ПГТУ, tpv@matmod.pstu.ac.ru
Волегов Павел Сергеевич, аспирант ПГТУ, crocinc@mail.ru