

П.В. Трусов, П.С. Волегов

Пермский государственный технический университет

**ФИЗИЧЕСКИЕ ТЕОРИИ ПЛАСТИЧНОСТИ: ТЕОРИЯ
И ПРИЛОЖЕНИЯ К ОПИСАНИЮ НЕУПРУГОГО
ДЕФОРМИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ.
Ч. 1: ЖЕСТКОПЛАСТИЧЕСКИЕ
И УПРУГОПЛАСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ**

Приводится обзор широкого класса теорий пластичности, получивших название физических теорий пластичности (в иностранной литературе – crystal plasticity theories), в основе формулировок определяющих соотношений, гипотез и основных положений которых лежит рассмотрение в явной форме механизмов деформирования на мезо- и микромасштабах. Первая часть обзора посвящена рассмотрению «классических» жесткопластических и упругопластических физических теорий, в частности моделей типа Тейлора–Бишопа–Хилла и Линя, а также их модификаций. Особое внимание уделено «тонким местам» приводимых теорий, их критическому анализу и способам решения проблем, возникающих при их использовании для описания процессов неупругого деформирования материалов.

Ключевые слова: физические теории пластичности, закон Шмида, модель Тейлора, модель Бишопа–Хилла, модель Линя.

Параллельно с созданием и развитием континуальных подходов в механике начиная с XX века интенсивно велись (и ведутся по сей день) работы по созданию теорий, основанных на рассмотрении глубинных физических механизмов деформирования, присущих всем телам или их достаточно широким классам (например, металлам и сплавам). Сильнейшим импульсом для развития подобных теорий пластичности было открытие в 30-х годах XX века дислокаций, а вслед за этим – и других дефектов кристаллического строения материалов.

Под физическими теориями пластичности (ФТП) принято понимать широкий класс теорий пластичности, в основе формулировок определяющих соотношений, гипотез и основных положений которых лежит рассмотрение в явной форме механизмов деформирования на мезо- и микромасштабах (т.е. масштабных уровнях, меньших уровня представительного объема в макросмысле, или представительного объема в инженерном смысле). Указанное обстоятельство составляет основное отличие ФТП от теорий пластичности, рассматриваемых в ву-

зовских курсах [2,3,10] (называемых в литературе по механике деформируемого твердого тела (МДТТ) обычно математическими теориями), в которых с самого начала формулировка теории осуществляется в терминах континуальной механики, полей напряжений, деформаций и других параметров.

Следует отметить, что возникновение и развитие физических теорий пластичности как отдельной ветви теории пластичности неразрывно связано с пионерскими работами Дж. И. Тейлора, К.Ф. Элам [41–43] и Г.О. Закса [33]. С этого времени появилось огромное количество различных вариантов физических теорий, но практически во всех из них наблюдаются «родовые признаки» теорий указанных авторов, в особенности Дж. И. Тейлора.

Установление масштабных уровней, вовлекаемых в рассмотрение в конкретном варианте ФТП, определяется требованиями исходной постановки задачи, особенностями исследуемых процессов, известными сведениями или гипотетическими представлениями о лидирующих и аккомодационных процессах, определяющих неупругое деформирование. Решение вопроса о выборе уровней не лишено и субъективного компонента – квалификация исследователя, его приверженность тем или иным подходам, доступность тех или иных инструментальных средств и т.д. В настоящее время диапазон микро- и мезомасштабов чрезвычайно широк – от 10^{-19} см³ до 10^{-3} см³.

Основным механизмом неупругого деформирования монокристаллов в ФТП считается движение краевых дислокаций. То что именно движущиеся дислокации являются основным источником появления необратимых деформаций – факт, подтвержденный огромным количеством экспериментов. Включение в рассмотрение только краевых дислокаций обусловлено отчасти сложившейся в ФТП традицией; кроме того, винтовые дислокации имеют большую энергию активации и меньшую плотность по сравнению с краевыми дислокациями.

Условием активации k -й системы скольжения является достижение касательного напряжения в ней некоторого критического напряжения $\tau_c^{(k)}$ (закон Шмида):

$$\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} = \tau_c^{(k)}, \quad \sum_k \quad (1)$$

где $\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} \left(\sum_k \right)$ – ориентационный тензор k -й системы скольжения;

чаще в литературе в качестве ориентационного тензора $\mathbf{m}^{(k)}$ k -й системы используется симметричная часть диадного произведения

$$\mathbf{m}^{(k)} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} + \mathbf{n}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \right), \quad \sum_k$$

В соответствии с уравнением Орована при наличии K активных систем скольжения (СС) (т.е. СС, для которых удовлетворяется закон Шмида (1)) в произвольный момент деформирования девиатор пластической составляющей тензора деформации скорости определяется соотношением

$$\mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^K \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \quad (2)$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига в k -й СС. Здесь и далее величины, относящиеся к макроуровню (представительному макрообъему), будут обозначаться заглавными буквами, аналогичные величины мезоуровня – такими же строчными буквами.

Как показывают эксперименты, при множественном скольжении увеличение критического напряжения сдвига на единицу сдвига оказывается большим, чем при одиночном скольжении. Тейлором [41] был предложен закон изотропного упрочнения, согласно которому приращения критических касательных напряжений во всех активных системах скольжения одинаковы и определяются суммарным сдвигом по всем активным системам. Указанный закон широко используется в различных модификациях физической теории пластичности. Кроме того, во многих работах принимается, что деформационное и скрытое упрочнения также одинаковы; в то же время следует отметить, что экспериментальные исследования свидетельствуют о некотором превышении латентного упрочнения над деформационным.

Определенные успехи, достигнутые при построении моделей монокристалла, побудили исследователей к использованию последних для описания поведения поликристаллов. Основной особенностью последних в сравнении с монокристаллами является наличие в первых множества различно ориентированных кристаллических микрообъек-

тов (с относительно правильным строением кристаллической решетки) и существование границ между этими микрообъектами; в дальнейшем указанные области для краткости будем называть зернами.

Границы зерен оказывают на поведение поликристаллов весьма существенное влияние. Границы представляют собой специфические области дефектной структуры с характерной толщиной – от нескольких межатомных расстояний до долей мкм (в зависимости от типа границы) и плотностью дислокаций в 1,2–1,4 раз выше, чем в зернах [6], что обуславливает и повышенную удельную внутреннюю энергию границ по сравнению с зернами. В связи с этим границы зерен могут выступать и как специфический механизм неупругого деформирования (так называемого зернограничного скольжения); возможно, более существенное влияние на процесс неупругого деформирования они оказывают как генераторы дислокаций и как «устройства», реализующие аккомодационные механизмы.

Кроме того, на границах зерен реализуются ограничения, накладываемые на пластическое деформирование зерна различным ориентированными соседними зернами; например, скольжение дислокаций в одном зерне не может свободно продолжаться в соседнем с ним зерне в силу несовпадения кристаллографических систем. Наличие этих разориентировок СС соседних зерен служит одним из основных источников активизации ротационных мод деформирования поликристаллов, является причиной существенной неоднородности деформирования зерен и возникновения концентраторов напряжений (особенно – в так называемых тройных стыках зерен). В большинстве работ по ФТП учитывается именно второй аспект влияния границ, связанный со стеснением пластических деформаций за счет разориентировки соседних зерен.

Одним из базовых вопросов ФТП является вопрос о способе объединения «подмоделей» отдельных монокристаллов-зерен в модель поликристаллического агрегата. Известные на сегодняшний момент ФТП являются как минимум двухуровневыми; такие гипотезы позволяют выбрать способ передачи воздействий с макроуровня на нижележащие уровни. При этом выбор гипотезы существенным образом влияет на результаты описания эволюции микроструктуры (в частности – формирования текстуры).

Наиболее распространенной в ФТП является гипотеза Фойгта (в некоторых работах ее называют гипотезой Тейлора), согласно которой

полные деформации (или деформации скорости) зерен, входящих в поликристаллический агрегат, полагаются равными средней деформации скорости. Иначе говоря, передача воздействий с макроуровня на мезоуровень при принятии этой гипотезы осуществляется кинематическим способом.

Другой распространенной гипотезой является гипотеза Рейса (называемая в некоторых работах гипотезой Закса), в соответствии с которой однородными по поликристаллическому агрегату являются напряжения. Таким образом, применение этой гипотезы соответствует силовому (статическому) способу передачи воздействий.

Гипотеза Фойгта дает так называемую верхнюю оценку (интенсивность напряжений получается наибольшей из всех гипотез), гипотеза Рейса – нижнюю оценку. Понятно, что ни одна из этих гипотез полностью не отражает реального взаимодействия зерен (субзерен, фрагментов и т.д.) в поликристалле. В связи с этим значительное число статей посвящено поиску новых способов соединения подмоделей монокристаллов в модель поликристалла. Согласно одному из таких способов параметры процесса предлагается осреднять по результатам расчета с применением каждой из указанных гипотез по отдельности. В работе [31] вводится взвешенное осреднение всех параметров процесса (напряжений, деформаций скорости, скорости поворота решетки), полученных при применении указанных гипотез. Весовой коэффициент w полагается назначаемой величиной в пределах от 0 (соответствует гипотезе Фойгта) до 1 (гипотезе Рейса). Наряду с взвешенным осреднением полученных по отдельности результатов с использованием гипотез Фойгта и Рейса (линейная модель) предлагается более сложная нелинейная модель осреднения. Последняя основана на минимизации функции $r = (1-w)r_d + wr_\sigma$, где r_d и r_σ соответственно отклонения нормы локальной деформации скорости от средней и локальных напряжений (в зернах) от средних по поликристаллическому агрегату. Минимизация функции r позволяет определить нелинейную зависимость локальных скорости деформаций и напряжений от соответствующих осредненных величин.

Е. Кренером [25] было предложено линейное соотношение, связывающее локальные отклонения девиаторов напряжений $\mathbf{s}^{(n)}$ и пластических деформаций $\mathbf{e}^{(n)p}$ от осредненных $\langle \mathbf{s} \rangle$, $\langle \mathbf{e}^p \rangle$:

$$\langle \mathbf{s} \rangle - \mathbf{s}^{(n)} = m_{(n)} (\mathbf{e}^{(n)P} - \langle \mathbf{e}^P \rangle), \quad \sum_n$$

где $m_{(n)}$ – константа материала для n -го зерна. Нетрудно видеть, что полученное соотношение может быть проиллюстрировано структурно-механической моделью, состоящей из параллельно соединенных «цепочек», каждая из которых содержит последовательно соединенные упругий и пластический элементы с различными характеристиками.

В ФТП используются и более сложные подходы к объединению кристаллитов в поликристаллический агрегат. Один из них, называемый «самосогласованной моделью» (или «моделью среднего поля»), основан на решении краевой задачи об одиночном включении (зерне) в матрице, имеющей осредненные («эффективные») характеристики поликристалла. Аналитические решения подобной задачи возможны только для включений канонической формы. Известные самосогласованные модели требуют весьма существенных вычислительных ресурсов, в связи с чем большая часть исследователей предпочитает более простые подходы. С современными самосогласованными моделями можно познакомиться, например, в статье [32]; вариант самосогласованной модели для упруговязкопластической физической теории предложен в работе [40].

Существующие в настоящее время ФТП можно разделить на три широких класса: жесткопластические модели, упругопластические модели и вязкопластические модели. Здесь остановимся более подробно на первых двух классах.

1. Жесткопластические модели

Модель Закса

Одной из первых попыток построения одномерной модели поликристалла на основе рассмотрения совокупности монокристаллов была модель Закса [33]. В исходной формулировке эта модель предназначена только для определения предела текучести при одноосном растяжении поликристаллического образца по известному значению критического напряжения сдвига в СС монокристаллов-зерен и заданному закону распределения ориентаций кристаллографических систем координат (КСК) зерен по отношению к лабораторной системе координат (ЛСК).

Кратко перечислим ее основные гипотезы и соотношения:

- зерна полагаются ориентированными хаотически (по равномерному закону);
- взаимодействием между зернами пренебрегается (в силу чего эту модель можно назвать «полностью несовместной», как по деформациям, так и по напряжениям).

Рассмотрим одноосное нагружение цилиндрического образца из поликристаллического материала; ось x_1 с единичным вектором базиса e_1 направим вдоль оси образца. В рассматриваемом случае все компоненты тензора напряжений Коши σ за исключением σ_{11} полагаются нулевыми. Мысленно пересечем образец плоскостью, перпендикулярной его оси, и выделим все зерна, пересекаемые данным сечением (рис. 1). В модели Закса полагается, что каждое из зерен также находится в состоянии однородного одноосного растяжения (сжатия), как и образец в целом, однако величины напряжений σ_{11} в каждом зерне могут отличаться от напряжений в других зернах.

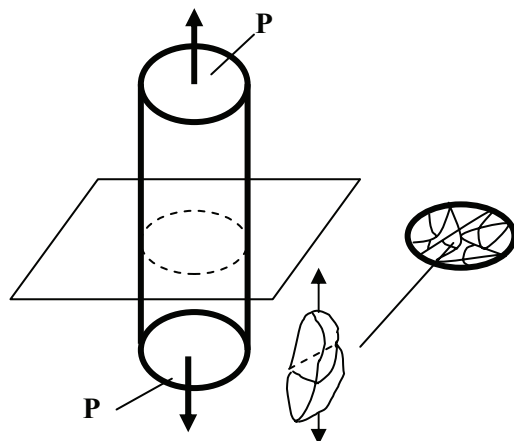


Рис. 1. Схема к модели Закса

Величина напряжений в каждом зерне определяется из условия достижения касательным напряжением хотя бы в одной СС («слабейшем звене») величины критического напряжения сдвига τ_c , считающейся известной для анализируемого типа кристаллитов-зерен и одинаковой для всех зерен. Таким образом, для каждого из зерен, попавших на введенное сечение, зная ориентацию КСК относительно ЛСК, вначале определяется

максимальный фактор Шмида $m_g^{(k)} = \frac{\sigma}{|\sigma|} : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$, $(\sum_{(k)})$ (для рассматриваемого случая одноосного нагружения $m_g^{(k)} = \mathbf{e}_1 \mathbf{e}_1 : \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$, $(\sum_{(k)})$).

Тогда для каждого n -го зерна напряжение $\sigma_{11}^{(n)}$ определяется как $\sigma_{11}^{(n)} = \tau_c / \max_k m_g^{(k)}$. Обозначив через $S_{(n)}$ площадь поперечного сечения n -го зерна, пересекаемого введенным сечением, а через S – площадь поперечного сечения образца в целом, предел текучести при одноосном нагружении определим соотношением

$$\sigma_s = \frac{\sum_{n=1}^N \sigma_{11}^{(n)} S_{(n)}}{S}.$$

Расчеты по модели Закса дают значение макроскопического напряжения текучести σ_s , равное $2,2\tau_c$. Хотя полученный результат существенно (примерно на 30 %) отличается от экспериментально определенного предела текучести, его все же следует признать удовлетворительным для своего времени.

К основным недостаткам модели Закса относятся невыполнение условий равновесия и совместности деформаций соседних зерен, неучет упругих деформаций; указанные недостатки отмечаются во многих работах (например, [26], где приведен и краткий обзор ранних работ по физическим теориям пластичности). Модель Закса может быть использована для определения предела текучести при одноосном нагружении, для построения кривой σ – ϵ требуются дополнительные предположения.

Модель Тейлора

Вероятно, первой достаточно реалистичной попыткой установления связи σ – ϵ при одноосном нагружении поликристалла на основе соотношений для монокристалла можно признать модель Тейлора [41]. При её построении Тейлором использованы следующие гипотезы:

1. Поликристалл представляет собой агрегат из большого числа хаотично ориентированных зерен.
2. Поведение каждого из зерен описывается жесткопластической моделью; деформации зерен осуществляются только кристаллографи-

ческим сдвигом по известным для данного материала кристаллографическим системам (скольжения).

3. Упрочнение одинаково во всех системах скольжения и определяется свойствами монокристалла.

4. Границы зерен имеют нулевую толщину, не осуществляют вклада в механизмы неупругого деформирования.

5. Деформации (или деформации скорости) полагаются однородными в пределах макроскопического представительного объема (гипотеза Фойгта), т.е. $\boldsymbol{\varepsilon}^{p(k)} = \langle \boldsymbol{\varepsilon}^p \rangle = \boldsymbol{\varepsilon}$ (или $\mathbf{d}^{p(k)} = \langle \mathbf{d}^p \rangle = \mathbf{D}$). Кроме того, поскольку деформации осуществляются сдвигом, в этом случае отсутствует изменение объема, т.е. $\boldsymbol{\varepsilon}^{p(k)} = \mathbf{e}^{p(k)} = \langle \mathbf{e}^p \rangle = \boldsymbol{\varepsilon}$ (или $\mathbf{d}^{p(k)} = \mathbf{d}^{*p(k)} = \langle \mathbf{d}^p \rangle = \mathbf{D}$, $\mathbf{d}(\mathbf{d}^*)$ – тензор (девиатор) деформации скорости мезоуровня).

В наиболее распространенных кристаллах с ГЦК и ОЦК-решеткой число систем скольжения существенно превышает число независимых компонент девиатора деформаций, что обуславливает неоднозначность определения сдвигов по кристаллографическим плоскостям по заданному девиатору деформаций. Указанное обстоятельство является одной из существенных трудностей построения физических теорий пластичности.

Для ее преодоления Тейлором был предложен эвристический принцип, суть которого состоит в следующем. Полагается, что любая деформация (или приращение деформации) осуществляется сдвигом по не более чем пяти независимым системам скольжения (СС), определенным из условия минимальности суммарного сдвига. Представляющий, по существу, гипотезу, данный принцип минимума сдвига основывался на наблюдениях за поведением одиночных кристаллов.

В случае отказа от предположения об изотропном упрочнении в каждом из зерен принцип минимума сдвига трансформируется в принцип минимума мощности, согласно которому действительные скорости сдвига доставляют минимум мощности (по сравнению с кинематически возможными скоростями сдвигов):

$$\sum_{k=1}^{K_n} \tau_c^{(n)k} \dot{\gamma}_{(n)}^{(k)} \rightarrow \min \quad \forall n = \overline{1, N}. \quad (3)$$

Как отмечено выше, критические напряжения сдвига в исходной модели Тейлора приняты одинаковыми во всех системах данного зерна и обозначаются как $\tau_c^{(n)}$. Тогда элементарная работа $dA^{(n)}$, произведенная в n -м зерне объемом $V^{(n)}$, определяется соотношением:

$$dA^{(n)} = V^{(n)} \tau_c^{(n)} \sum_{k=1}^{K_n} d\gamma_{(k)}^{(n)}, \quad (4)$$

где K_n – число активных систем скольжения в данном n -м зерне в рассматриваемый момент нагружения.

Элементарная работа dA , производимая на сдвигах по активным СС в агрегате из N монокристаллов, определяется следующим соотношением:

$$dA = \sum_{n=1}^N V^{(n)} \tau_c^{(n)} \sum_{k=1}^{K_n} d\gamma_{(k)}^{(n)}. \quad (5)$$

Заметим, что в правой части (5) суммирование по числу активных СС осуществляется от 1 до K_n , т.е. в различных зернах это число может быть различным ($1 \leq K_n \leq 5$).

В модели Тейлора полагается, что вся подводимая к образцу механическая энергия расходуется на совершение пластической деформации. В случае одноосного нагружения (при действии напряжения σ_{11}) элементарная работа внешних сил в предположении одноосного макроскопического напряженно-деформированного состояния равна $\sigma_{11} d\varepsilon_{11} \left(\sum V^{(n)} \right) \equiv \sigma_{11} d\varepsilon_{11}^p \left(\sum V^{(n)} \right)$. Тогда, приравнивая работу внешних напряжений и работу внутренних сдвиговых напряжений, получаем

$$\sigma_{11} d\varepsilon_{11} \left(\sum_{n=1}^N V^{(n)} \right) = \sum_{n=1}^N \left(V^{(n)} \tau_c^{(n)} \sum_{k=1}^{K_n} d\gamma_{(k)}^{(n)} \right). \quad (6)$$

Предполагая, что все зерна имеют одинаковый объем, окончательно получаем

$$\sigma_{11} d\varepsilon_{11} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \left(\tau_c^{(n)} \sum_{k=1}^{K_n} d\gamma_{(k)}^{(n)} \right). \quad (7)$$

Последнее соотношение позволяет построить кривую одноосного нагружения поликристалла с использованием модели монокристалла. Процедура пошагового построения кривой состоит в следующем:

- Пусть кривая построена для определенной предшествующей деформации ε_{11} , т.е. известны напряжения σ_{11} во все предшествующие моменты нагружения, накопленные сдвиги, критические напряжения сдвига во всех зернах; ориентация зерен полагается неизменной и известной.

- Задается достаточно малое приращение деформации $\Delta \varepsilon_{11}$, являющееся одновременно приращением главной деформации $\Delta \varepsilon_1 = \Delta \varepsilon_{11}$; из условия несжимаемости определяются два других главных значения приращений деформаций $\Delta \varepsilon_2 = \Delta \varepsilon_3 = -1/2 \Delta \varepsilon_1$ (при этом $\Delta \varepsilon_2 = \Delta \varepsilon_{22}$, $\Delta \varepsilon_3 = \Delta \varepsilon_{33}$, все остальные компоненты тензора $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ равны нулю). Следует подчеркнуть, что в данном случае главные оси тензоров $\boldsymbol{\varepsilon}$ и $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ совпадают и неизменны. По заданному тензору $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ данного шага нагружения в каждом зерне определяются приращения сдвигов по активным СС, обеспечивающим минимальность приращения суммарного сдвига.

- По накопленным сдвигам (с учетом приращений на рассматриваемом шаге) определяются критические напряжения сдвига в каждом зерне $\tau_c^{(n)}$, $n = \overline{1, N}$, после чего легко определяется значение правой части (7) и величина Σ_{11} .

Тейлор применил описанную процедуру для построения кривой одноосного деформирования алюминия (ГЦК-решетка). Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными, что подтверждает приемлемость модели для рассмотрения, по крайней мере, одноосного нагружения.

Таким образом, модель Тейлора [41] сводится к минимизации мощности работы на сдвигах (в пространстве скоростей сдвигов) (3)

при ограничении $\sum_{k=1}^{K_n} \mathbf{m}_{(n)}^{(k)} \dot{\gamma}_{(n)}^{(k)} = \mathbf{d} \quad \forall n = \overline{1, N}$, накладываемом гипотезой

Фойгта, после чего для определения девиатора напряжений используется соответствующее условие текучести ($f(\mathbf{s}) = \mathbf{m}^{(k)} : \mathbf{s} - (\pm \tau_c^{(k)}) = 0$, $k = \overline{1, K}$

или $f(\mathbf{s}) = |\mathbf{m}^{(k)} : \mathbf{s}| - |\tau_c^{(k)}| = 0$, $k = \overline{1, 2K}$) с ориентационными тензорами, соответствующими активным системам скольжения.

Заметим, что в собственно модели Тейлора девиатор напряжений вообще отсутствует, напряжения априори полагаются такими, что активизируют все необходимые для реализации предписанной скорости деформации системы скольжения, причем число СС равно числу независимых компонент девиатора напряжений. Компоненты девиатора напряжений определяются на втором этапе, после определения активных СС и скоростей сдвига по ним. Для этого используется закон Шмида, представляющий в этом случае систему линейных алгебраиче-

ских уравнений относительно компонент девиатора напряжений (число уравнений равно числу активных систем скольжения).

Резюмируя, можно отметить следующие проблемы, возникающие при применении модели Тейлора:

1. Неединственность определения совокупности 5 скоростей сдвига, реализующих предписанный девиатор скоростей деформаций.

2. Возможное несоответствие напряженного состояния виду деформированного состояния (например, при одноосном деформировании напряженное состояние может отличаться от одноосного).

3. Невозможность определения тензора напряжений по скоростям девиатора деформаций, поскольку имеем материал со связью (несжимаемость).

4. Не исключена ситуация, когда минимум мощности достигается на совокупности систем скольжения с числом нетривиальных скоростей сдвига, меньшем 5 (например, при совпадении систем скольжения с плоскостями и направлениями главных скоростей сдвига). Эта ситуация соответствует нахождению изображающей точки в пространстве напряжений (ИТН) на грани или ребре многогранника текучести. Ряд авторов трактует данную ситуацию как так называемое вырождение системы уравнений. Это представляется не совсем верным. Действительно, в модели Тейлора поиск осуществляется именно в вершинах многогранника и число уравнений должно соответствовать числу неизвестных компонент девиатора напряжений (случай большего числа упомянут выше). Однако в данном случае (3) не дает критерия отбора единственного набора активных систем скольжения и решению с точки зрения минимума мощности сдвига удовлетворяют все ИТН в вершинах многогранника текучести, примыкающие к данной грани или ребру, хотя напряжения при этом существенно отличаются. Последнее возможно, например, в случае чистого сдвига при ориентации одной из систем скольжения, в точности соответствующей сдвигу по данной системе.

5. Невыполнение условий равновесия на границах зерен.

6. Сложность реализации модели, связанная с необходимостью определения активных систем скольжения и сдвигов в них, доставляющих минимум суммарному сдвигу. Процедура решения данной задачи минимизации оказывается весьма трудоемкой.

7. Неучет в модели Тейлора упругих деформаций.

Заметим, что часть (п. 2, 3, 4) из указанных выше недостатков в известных авторам работах не отмечалась. Однако и отмеченных ранее оказалось вполне достаточно, чтобы стимулировать исследователей к совершенствованию модели Тейлора. В первую очередь появились работы, направленные на «подведение» под модель Тейлора более глубокой математической «базы», замена интуитивно высказанных положений математически строго доказанными. Значительное внимание в работах последнего десятилетия уделяется законам упрочнения по системам скольжения. Например, в работе [47] за основу принимается закон упрочнения типа Воуса, который модифицируется для учета взаимодействия дислокаций разных систем скольжения, в том числе – аннигиляции дислокаций при изменении направления нагружения. При этом основные положения и гипотезы модели Тейлора остались неизменными. К числу наиболее ярких работ этого направления относятся статьи Бишопа и Хилла [15–16], анализируемые ниже.

Модель Бишопа–Хилла

С точки зрения физических гипотез модель Бишопа–Хилла практически не отличается от модели Тейлора, основное отличие состоит в ее математической строгости, наличии доказательств основных принципов, принимаемых в модели Тейлора как постулаты. По существу, данная модель (равно как и модель Тейлора) является двухуровневой (мезо- и макроуровни). В модели макроуровня используется понятие поверхности текучести, $f(\mathbf{S}) = \sigma_s$, при этом построение поверхности текучести осуществляется с применением модели мезоуровня; принимаются соотношения ассоциированного закона течения, $d\mathbf{E}^p = d\lambda \frac{\partial f}{\partial \mathbf{S}}$.

Полагается, что упругими деформациями можно пренебречь; пластическое деформирование осуществляется без изменения объема, $d\mathbf{E}^p = d\mathbf{E}^p$. В теории используется также известный в теории пластичности принцип максимума работы: из всех возможных (т.е. не нарушающих условие текучести) напряжений действительное напряжение производит максимальную работу на приращении (пластических) деформаций.

В цитируемых работах Бишопа и Хилла доказывается также обратное (в определенном смысле) утверждение: если для заданного $d\mathbf{E}$ напряжения Σ доставляют стационарное (или максимальное) значение работе по сравнению со всеми близкими напряжениями Σ^* , не выхо-

дьящими за пределы поверхности текучести, то существует пластический потенциал, и он совпадает с поверхностью текучести; в случае максимальной работы соответствующая поверхность (изопотенциальная или поверхность текучести) является строго выпуклой.

На мезоуровне (уровне зерна) модель использует все основные предположения, принятые в модели Тейлора. Полагается, что упрочнение одинаково в активных и неактивных системах скольжения; однако при этом в активных системах возможно различие критических напряжений по противоположным направлениям скольжения, т.е. условие текучести имеет вид $f(\mathbf{s}) = |\mathbf{m}^{(k)} : \mathbf{s}| - |\tau_c^{(k)}| = 0$, $k = \overline{1, 2K}$. В оригинальном варианте модели [15] законы упрочнения практически не обсуждаются, поскольку не приводят к изменению структуры теории и ее основных соотношений.

Для монокристалла формулируется принцип максимума работы; следует отметить, что в работах Бишоп и Хилла этот принцип доказывается, а не постулируется, как это принято в теории пластичности.

Заметим, что в отличие от предположения Тейлора о том, что деформация реализуется сдвигом по не более чем пяти системам скольжения, здесь такого предположения не вводится, число активных систем скольжения ограничивается только числом возможных кристаллографических систем, что еще более усугубляет проблему неоднозначности определения сдвигов. Принцип минимума сдвига не позволяет определить единственный набор систем скольжения, он обеспечивает только «отбраковку» векторов сдвига, не являющихся физически возможными.

Хотя в физических теориях пластичности большое внимание уделяется построению моделей монокристаллов, главной задачей является формулировка конститутивной модели представительного объема макроуровня для поликристаллических материалов, без чего невозможна постановка и решение практически важных краевых задач МДТТ. В связи с этим неминуемо встают вопросы о переходе от переменных и соотношений мезоуровня к переменным и соотношениям макроуровня, о процедурах идентификации и верификации разрабатываемых моделей. При этом одним из важных компонентов модели становится принимаемая процедура осреднения.

Физические теории пластичности в их различных модификациях в значительной мере опираются на макроэксперименты. В частности, из макроэкспериментов определяются физические параметры (или

часть из них), фигурирующие в описании микродеформирования; правильность основных положений ФТП проверяется в конечном счете также в опытах на макрообразцах. В связи с вышесказанным в замкнутой ФТП должны присутствовать подходы и соотношения, позволяющие связывать микро- и макропеременные.

При проведении экспериментов и интерпретации результатов в рассмотрение входят напряжения и деформации, осредненные по большому числу мезоэлементов (зерен). Понятно, что интерпретация результатов макроэкспериментов с позиций ФТП существенным образом связана с принимаемой процедурой осреднения. Ниже рассматриваются некоторые аспекты принятого в теории Бишопа–Хилла подхода к осреднению, опирающегося на две основные гипотезы о связи микро- и макропараметров:

а) измерения макропеременных осуществляются на таких объемах, что распределение ориентаций и упрочнения зерен в различных объемах отличаются несущественно. Иначе говоря, образец полагается однородным в макросмысле. Следует отметить, что это не исключает из рассмотрения анизотропные материалы, поскольку распределение ориентаций не обязательно равномерное, могут реализовываться случаи преимущественной ориентации в определенных направлениях;

б) отсутствует корреляция между мезоскопическими напряжениями и положением на плоскости произвольного сечения единичной площади. Данное предположение позволяет представить результирующую мезонапряжений на такой единичной площадке как одиночную силу, приложенную в центре площадки. Выбирая далее декартову ортогональную систему координат, по компонентам определенной таким образом силы нетрудно получить компоненты тензора мезонапряжений, причем последний будет симметричным.

В случае если корреляция между мезонапряжениями и положением в единичном сечении существует, тензор мезонапряжений не обязательно симметричный. В этом случае уравнение баланса момента количества движения отличается от классического, в рассмотрение необходимо вводить тензор моментных напряжений; иначе говоря, от классического континуума следует переходить к обобщенному (например, континууму Коссера). Заметим, что подобное определение напряжений возможно на различных масштабных уровнях, включая используемый в некоторых вариантах ФТП так называемый «атомный»

(представительный объем атомного уровня можно определить как объем совершенной кристаллической решетки, содержащей 10^3 – 10^6 атомов).

Значительная часть [15] посвящена процедуре построения функции текучести для представительного объема (ПО) поликристалла исходя из известных критических напряжений на СС зерен, входящих в данный ПО. Как представляется, подобная процедура является излишней. Действительно, на макроуровне можно использовать закон Гука в скоростной релаксационной форме $\dot{\Sigma} = C : (D - D^p)$ (в случае больших градиентов перемещений материальная производная заменяется на коротационную). Пластическая составляющая тензора деформации скорости определяется непосредственно по скоростям сдвигов по СС зерен, входящих в ПО, той или иной процедурой осреднения (чаще всего – ориентационного).

Сопоставляя модель Бишопа – Хилла с ранее изложенной моделью Тейлора, нетрудно убедиться, что концептуальные положения обеих моделей практически совпадают (а следовательно, модели Бишопа–Хилла присущи те же недостатки, что и модели Тейлора); модель Бишопа–Хилла отличается более глубокой «математической оснащенностью». Вероятно, это является причиной того, что в последнее десятилетие модели, имеющие в основе те же гипотезы и положения, что и модель Тейлора, стали называть моделями «типа Тейлора–Бишопа–Хилла».

Несмотря на отмеченные выше недостатки моделей Тейлора–Бишопа–Хилла, они являются одними из наиболее широко используемых. В последние 10–15 лет модели этого класса часто применяются для анализа различных технологических процессов обработки металлов давлением. Пример применения модели для исследования процесса механической обработки (ортогонального резания) монокристаллической заготовки содержится в работе [19]. Анализируется изменение удельной энергии и сил резания в зависимости от ориентации кристаллической решетки относительно режущего инструмента.

Дальнейшее развитие моделей этого класса связано, в частности, с совершенствованием математической основы моделей, модификацией соотношений теории для учета поворотов кристаллической решетки. Например, в работе [20] наряду с трансляционной (сдвиговой) модой деформирования идеально-пластического монокристалла предлагается ввести дополнительные параметры, характеризующие ориентацию кристал-

лической решетки (три угла Эйлера). В качестве ключевой гипотезы вводится предположение об аддитивном разложении градиента скорости перемещений на пластическую составляющую, определяемую скоростями сдвигов по активным СС, и спин решетки. Одной из известных трудностей – задание граничных условий для скорости поворота решетки – автор предлагает избежать за счет задания так называемых «глобальных кинематических условий», согласно которым в исследуемом теле вводятся материальные направления с запрещенными поворотами (например, вдоль оси растягиваемого образца). Как представляется, указанные гипотезы не имеют достаточного физического обоснования даже для монокристаллов. Детальное изложение моделей Тейлора, Бишопа–Хилла и обзор работ по их применению содержится в статье [21].

Из работ последних лет следует отметить статью [22], где представлено детальное аналитическое исследование стесненной осадки монокристаллов с ГЦК-решеткой (алюминий, медь, пермаллой), трение на поверхностях контакта образца с пуансоном и матрицей отсутствует. Рассматривается случай специальных ориентировок: ось нагружения расположена в плоскости $(1\ 1\ 0)$, ориентировка нормали к этой плоскости по отношению к оси запрещенных перемещений (или к направлению свободного деформирования) принимает произвольные значения. Приведены аналитические выражения скоростей сдвига в СС, компонент вектора ротации решетки. Используется жесткопластическая модель, законы упрочнения учитывают различный характер взаимодействия дислокаций разных СС, которые разделены на пять групп. Исследуются устойчивость ориентации оси нагружения (по отношению к кристаллографическим осям), вращения решетки, сдвиговые деформации в плоскости, ортогональной оси нагружения; сравнение аналитических результатов с экспериментальными данными обнаруживает очень хорошее соответствие. Работа представляет особый интерес для оценки приемлемости той или иной физической теории, для отладки моделей.

2. Упругопластические модели

Следует отметить, что большинство упругопластических моделей (равно как и упруговязкопластических) используют гипотезу аддитивности упругих \mathbf{d}^e и неупругих \mathbf{d}^{in} составляющих тензора деформации скорости и (изотропный или анизотропный) закон Гука:

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^{in}, \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : \mathbf{d}^e = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^{in}), \quad (8)$$

или ОС в так называемой релаксационной форме; аналогичные соотношения принимаются и на макроуровне. Вместо материальной производной тензора напряжений в геометрически нелинейном случае применяется та или иная «объективная производная», чаще всего – коротационная. Основное отличие заключается в части конститутивной модели, используемой для определения неупругой составляющей тензора деформации скорости.

Модель Линя

В большинстве работ по физической теории пластичности в качестве одного из основных недостатков моделей Тейлора, Бишопа–Хилла и их модификаций отмечается неучет упругих деформаций. Т.Г. Линь полагал [4, 30], что упругими деформациями можно пренебречь в случае больших пластических деформаций, что недопустимо в ситуации, когда эти составляющие имеют один порядок. Однако подобная ситуация при анализе упругопластического деформирования представляет ограниченный интерес даже в теоретическом плане и весьма редко встречается в практически важных задачах. Тем не менее включение в рассмотрение упругих деформаций представляется необходимым исходя из потребности определения остаточных напряжений (второго рода), во многом определяющих прочностные характеристики материала, и накапливаемой упругой энергии; кроме того, при учете упругих деформаций снимается предположение о несжимаемости материала. Отметим, что первоначально модель Линя сформулирована для случая малых деформаций.

Модель Линя базируется на следующих основных гипотезах:

- Скорости полных деформаций поликристаллического агрегата представляются суммой упругих и пластических составляющих (штрихами обозначены девиаторы соответствующих тензоров):

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^p, \quad \mathbf{d}' = \mathbf{d}'^e + \mathbf{d}'^p. \quad (9)$$

- Скорости полных деформаций отдельных зерен поликристалла $\mathbf{d}^{(n)}$ ($n = 1, 2, \dots, N$) равны скоростям полных деформаций поликристаллического агрегата (т.е. для скоростей полных деформаций используется гипотеза Фойгта):

$$\mathbf{d}^{(n)} = \mathbf{d} = \mathbf{D}, \quad \mathbf{d}'^{(n)} = \mathbf{d}' = \mathbf{D}'. \quad (10)$$

- Пластические деформации являются изохорическими, изменение объема определяется первым инвариантом упругих деформаций.
- Пластические деформации обусловлены сдвигом по кристаллографическим системам скольжения и подчиняются закону Шмида.
- Упрочнение изотропно и определяется суммарным сдвигом по всем активным системам скольжения.

Рассмотрим соотношения для произвольно выбранного зерна. При наличии одной активной системы скольжения k скорость сдвига $\dot{\gamma}^{(k)}$ в ней связана со скоростью пластической деформацией \mathbf{d}^p соотношением

$$\mathbf{d}^p \equiv \mathbf{d}'^p = \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \quad \sum_k \cdot \quad (11)$$

При активизации нескольких систем скольжения девиатор пластической деформации определяется выражением

$$\mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^K \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \quad (12)$$

где K – число активных систем скольжения.

В соответствии с гипотезой 5 критические сдвиговые напряжения в каждой системе скольжения одинаковы и зависят от суммарного сдвига:

$$\tau_c^{(k)} = \tau_c = f \left(\sum_k \int |\dot{\gamma}^{(k)}| dt \right), \quad (13)$$

или в скоростях

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \dot{\tau}_c = f' \left(\sum_k \int |\dot{\gamma}^{(k)}| dt \right) \left(\sum_k |\dot{\gamma}^{(k)}| \right), \quad (14)$$

где $f'(\cdot)$ – производная функции f по накопленному сдвигу.

Скорости упругих деформаций в зерне определяются соотношением

$$\mathbf{d}^e = \mathbf{d} - \sum_{k=1}^K \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}. \quad (15)$$

Скорость изменения напряжений определяется согласно закону Гука (8).

Кратко рассмотрим алгоритм расчета напряженно-деформированного состояния поликристалла при произвольном жестком нагружении.

Рассматривается представительный макрообъем поликристаллического агрегата. В начальный момент материал полагается находящимся в естественной конфигурации, в силу чего все компоненты тензоров напряжений и деформаций равны нулю; ориентации всех СС полагаются заданными (тем или иным законом распределения). Для представительного объема полагается заданным закон нагружения (т.е. заданы все компоненты тензора деформации как функции времени (или возрастающего параметра), а следовательно, в каждый момент нагружения известны компоненты тензора деформации скорости).

На первом шаге материал является упругим; задавая тензор деформации скорости перемещений и учитывая, что $\mathbf{d}^e = \mathbf{d}$, определяем скорость изменения напряжений. Интегрируя, по последней определяем момент достижения в одной из СС (например, с номером 1) сдвигового напряжения, равного по модулю начальному критическому напряжению $\tau_{c0} = f(0)$. После этого начинается неупругое скольжение по системе 1 при возрастающей деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ (последняя определяется интегрированием \mathbf{d}). При этом в каждый момент деформирования должно выполняться условие пластического течения для активной СС

$$\boldsymbol{\tau}^{(1)} = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}^{(1)} = \tau_c = f(\gamma^{(1)}),$$

или

$$\mathbf{m}^{(1)} : \mathbf{c} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \mathbf{m}^{(1)} \gamma^{(1)}) = f(\gamma^{(1)}). \quad (16)$$

Таким образом, (16) представляет собой уравнение (в общем случае – нелинейное алгебраическое) для определения $\gamma^{(1)}$.

При выполнении (16) и возрастающем девиаторе деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ (в каждый момент времени определяемого интегрированием \mathbf{d} с использованием любой из известных схем) одиночный сдвиг продолжается до тех пор, пока в некоторой другой системе скольжения (например, 2) сдвиговое напряжение $\tau^{(2)}$ не достигнет критического значения $\tau_c = f(\gamma^{(1)})$. Начиная с этого момента, возрастание $\boldsymbol{\varepsilon}$ вызывает двойное скольжение по системам 1 и 2, при этом должны выполняться условия

$$\boldsymbol{\tau}^{(1)} = \boldsymbol{\tau}^{(2)} = \tau_c = f(\gamma^{(1)} + \gamma^{(2)}),$$

или

$$\mathbf{m}^{(1)} : \mathbf{c} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{k=1}^2 \mathbf{m}^{(k)} \gamma^{(k)}) = \mathbf{m}^{(2)} : \mathbf{c} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{k=1}^2 \mathbf{m}^{(k)} \gamma^{(k)}) = f(\gamma^{(1)} + \gamma^{(2)}), \quad (17)$$

(17) – система двух алгебраических уравнений для определения $\gamma^{(1)}$, $\gamma^{(2)}$.

Аналогичным образом рассматривается вовлечение в скольжение 3, 4 и 5-й систем скольжения. При этом на каждой из активных систем скольжения должно выполняться условие текучести. Возможно возникновение ситуации, когда условие текучести выполняется одновременно более чем в пяти системах скольжения (при использовании закона типа шмидовского для ГЦК-кристаллов это соответствует нахождению ИТН в одной из вершин, где пересекаются 6 или 8 гиперплоскостей [1]). В этом случае требуется привлекать дополнительные физические аргументы; например, опираясь на экспериментально известный факт о некотором превышении латентного упрочнения над деформационным (активным), предпочтение отдают ранее вовлеченным в скольжение системам – именно они считаются активными и далее.

В конкретных расчетах обычно используют систему уравнений типа (17), записанную в приращениях, например, вида

$$\mathbf{m}^{(i)} : \mathbf{c} : (\Delta \boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{k=1}^{K_a} \mathbf{m}^{(k)} \Delta \gamma^{(k)}) = f'(\gamma_{\Sigma}) \left(\sum_{k=1}^K \Delta \gamma^{(k)} \right), \quad i = \overline{1, K_a}, \quad (18)$$

где $f'(\gamma_{\Sigma}) = df / d\gamma_{\Sigma}$, $\gamma_{\Sigma} = \sum_j \int \dot{\gamma}^{(j)} dt$ – накопленный суммарный сдвиг по всем активным системам скольжения (в том числе и бывшим активными ранее, в текущий момент деформирования перешедших в разряд пассивных).

В работе [7] подробно рассматривается применение модели Линя при описании упругопластического деформирования монокристаллов; при этом учитывается анизотропия упругих и пластических свойств, внутризеренное дислокационное скольжение, геометрическая нелинейность и повороты кристаллической решетки. Подробно анализируется математическая постановка задачи одноосного деформирования монокристалла, обсуждаются подходы к интегрированию полученной системы дифференциальных уравнений при наличии поворотов кристаллической решетки. Предлагается вариант решения проблемы неединственности выбора активных систем скольжения для специальных

случаев ориентировки монокристалла. Проанализированы существующие модели поворота кристаллической решетки, в которых поворот решетки связывается с квазитвердым движением. Описан алгоритм реализации модели для одноосного растяжения и сжатия монокристалла, проанализированы соответствующие результаты модельных расчетов. Дальнейшим продолжением работы [7] является работа [8], в которой для описания процессов глубокого пластического деформирования поликристаллических материалов, сопровождающегося формированием текстуры и анизотропии упругих и пластических свойств, предлагается двухуровневая (макро- и мезоуровни) модель. Моделирование процесса деформирования на макроуровне осуществляется с применением конститутивных соотношений, включающих внутренние переменные, определяемые из модели мезоуровня, описанной в [7].

Для перехода к модели поликристалла используется один из известных подходов к осреднению (чаще всего – ориентационное осреднение).

Модель Линя по сравнению с ранее рассмотренными обладает тем преимуществом, что позволяет определять последовательность активных систем скольжения и учитывает упругие деформации. В то же время использование гипотезы Фойгта (об однородности полных деформаций в представительном микрообъеме) приводит к нарушению условий равновесия на границах зерен. В связи с этим в дальнейшем как Линем, так и другими исследователями предпринимались и предпринимаются попытки построения так называемых самосогласованных моделей пластичности поликристаллов, в которых выполняются как условия совместности деформаций, так и условия равновесия на границах зерен [4]. В значительной мере эти исследования опираются на решение Эшелби задачи об одиночном эллиптическом включении в бесконечной однородной упругой среде с эффективными характеристиками [4]. В дальнейших исследованиях (Кренер, Хилл) были рассмотрены более сложные задачи об одиночном включении в упруго-пластической среде с эффективными (осредненными) характеристиками. Самосогласованные модели являются эффективным инструментом при анализе «тонких» эффектов; например, в работе [13] такая модель применена для определения остаточных напряжений второго рода и запасаемой внутренней энергии при одноосном растяжении медных (99% чистоты) образцов, получаемых листовой прокаткой (последова-

тельно горячей и холодной). Приведены определения остаточных напряжений I, II и III рода, самоуравновешенных, соответственно, для всего исследуемого тела, для представительного объема макроуровня и в пределах зерна. Остаточные напряжения I и II рода и связанная с ними упругая энергия оказывают существенное влияние на механические свойства материалов и разрушение, тогда как с энергией напряжений III рода авторы связывают процессы рекристаллизации поликристаллических материалов.

Приведено краткое описание самосогласованной модели, зерна принимаются в форме эллипсоидов, находящихся в окружении упруго-пластического материала с эффективными характеристиками. В сжатой форме изложена численная процедура реализации модели. Приведено также описание методики экспериментального исследования остаточных напряжений (дифракции решетки при рентгеновском облучении).

Экспериментально определена функция распределения ориентаций, которая затем использована в модели для определения начальной ориентаций зерен. Рассматривается растяжение листовых образцов, вырезаемых перпендикулярно направлению прокатки, до деформаций 4, 8, 12, 16 и 23 %. Приведены результаты расчета остаточных напряжений, которые находятся в хорошем соответствии с экспериментально измеренными. Отмечается, что остаточные напряжения и запасаемая энергия малочувствительны к начальному распределению ориентаций зерен, тогда как эволюция текстуры при растяжении существенно зависит от начальной ориентации. Следует отметить, что самосогласованные модели требуют чрезвычайно больших вычислительных ресурсов.

Детальное изложение модификации упругопластической самосогласованной модели на случай больших градиентов перемещений представлено в статье [36]. Полагается, что каждое (эллипсоидальное) зерно может испытывать аффинные искажения формы и повороты как жесткого целого. В качестве ОС используется (анизотропный) закон Гука в скоростной релаксационной форме; используется коротационная производная тензора напряжений Коши, в качестве меры скорости поворота в которой принимается разность тензора вихря зерна и пластического спина (антисимметричного тензора скоростей сдвигов). Приведено краткое описание методики экспериментальных исследований внутренних деформаций и ориентации решеток зерен методом дифракции нейтронов. Рассмотрены задачи одноосного растяжения и

простого сдвига поликристаллических образцов из чистой меди и нержавеющей стали (с низкой энергией дефекта упаковки). Результаты расчета по предлагаемой методике сопоставляются с экспериментальными данными и с теоретическими результатами, полученными с помощью самосогласованной упруговязкопластической модели [27]. Для кривой «напряжение – деформация» и текстуры теоретические результаты по обеим методикам и экспериментальные данные показывают удовлетворительное соответствие.

Другим направлением развития физических упругопластических теорий является модификация законов упрочнения и определение изменения поверхности текучести для монокристаллов с целью включения в них постоянно обновляющихся экспериментальных и теоретических данных об эволюции дислокационных субструктур [48]. В цитируемой работе анализируются различные теории упрочнения, основанные на рассмотрении движения и взаимодействия дислокаций. Часть из этих теорий (сплетения дислокаций Хирша и Митчелла, ступенек дислокаций Мота, дислокаций леса Басинского, ячеистых структур Кульман–Вильсдорф) относится автором к механизмам изотропного упрочнения; другие теории (дисперсного упрочнения Орована и скоплений дислокаций Зигера) описывают кинематическое (анизотропное) упрочнение монокристаллов. Изотропное упрочнение считается одинаковым во всех СС: при активизации K систем скольжения

$\dot{\tau}_c^{(i)} = \sum_{k=1}^K \dot{\tau}_c^{(k)}$, где i «пробегают» все номера СС. Для описания кинематического упрочнения вводится геометрический фактор

$Q_{ij} = \mathbf{n}^{(i)} \mathbf{b}^{(i)} : \mathbf{b}^{(j)} \mathbf{n}^{(j)}$, тогда скорость изменения критического напряжения сдвига в i -й СС определяется соотношением

$\dot{\tau}_c^{(i)} = \sum_{k=1}^K Q_{ik} \dot{\tau}_c^{(k)}$. Детально рассматривается процедура построения эволюционирующей поверхности текучести в пространствах симметричного (6-мерного) и несимметричного (9-мерного) тензоров напряжений. Отмечается, что при реализации нагружения, контролируемого по деформациям, предпочтительнее использовать поверхность текучести в пространстве деформаций, в связи с чем аналогичная процедура рассматривается в терминах соответствующих пространств (6-мерном тензора малых деформаций и 9-мерном тензора дисторсии).

В развитие цитируемой работы в статье [49] рассматривается обобщение модели на случай геометрической нелинейности. Используется текущий лагранжев подход; закон Гука записывается в терминах производной Яуманна тензора напряжений Кирхгоффа. Приведены соотношения для определения начальной поверхности текучести в пространствах напряжений и деформаций; учет поворота (в упругой области рассматривается материальный поворот) приводит к появлению в уравнении квадратичных относительно напряжений и деформаций (соответственно в пространствах напряжений и деформаций) членов. Получены соотношения для эволюционирующей поверхности текучести; в упругопластической области учитывается как материальный поворот, так и ротация за счет сдвигов, причем последняя определена как сумма по всем активным системам произведений антисимметричной части ориентационного тензора на приращение сдвига. В терминах пространств напряжений и деформаций сформулированы критерии пластического деформирования и определяющие соотношения.

Отдельным (и достаточно сложным) вопросом, возникающим при построении математических моделей деформирования моно- и поликристаллов, является проблема определения правой части соотношений (13)–(14), определяющих закон изменения критических напряжений (или их скоростей) на системах скольжения – закон упрочнения. Эти законы, по сути, 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. В работах [9, 46] предлагается классификация эффектов, приводящих к упрочнению кристаллических тел при пластической деформации, основанная на рассмотрении физических механизмов упрочнения, и подход к описанию этих механизмов. Согласно предложенной классификации рассматриваются неориентированное и ориентированное упрочнение: первое описывает упрочнение независимо от направления деформирования (образование пересечений дислокаций, жгутов, кос, барьеров Ломера–Коттрелла);

такое упрочнение приводит к увеличению критического напряжения сдвига сразу на многих системах скольжения (или даже на всех сразу). Второе связано с накоплением упругой энергии на «поджатых дислокациях» (на различных барьерах), эта энергия может (полностью или частично) высвободиться при «развороте» направления деформирования. Второй тип может быть описан либо кинематическим законом упрочнения, либо законом одновременного изменения критических напряжений сдвига на противоположных системах скольжения. В механизмах ориентированного упрочнения выделяются эффекты, связанные с накоплением невысвобождаемой упругой энергии, накапливаемой на поджатых к препятствиям дислокациях. В качестве иллюстраций предлагаемого подхода к описанию упрочнения рассматриваются три известных эффекта: дополнительное существенно нелинейное упрочнение, связанное с реакциями на расщепленных дислокациях; эффект Баушингера, связанный с падением предела текучести при смене направления деформирования и обусловленный аннигиляцией предварительно поджатых дислокаций; зернограничное упрочнение, возникающее при взаимодействии внутризеренных (решеточных) дислокаций с дислокациями ориентационного несоответствия, располагающимися в границе.

В последние 10–15 лет физические упругопластические теории активно применяются для описания процессов глубокого пластического деформирования, особое внимание при этом уделяется анализу эволюции микроструктуры, в частности возникновению и развитию текстуры.

Одна из первых попыток конструктивного применения модели Линя для анализа поведения поликристаллов при сложном нагружении освещена в работе [45]. В первой части работы приведены и обсуждаются результаты экспериментов на сложное нагружение тонкостенных трубчатых латунных образцов. Исследуются траектории в виде двухзвенных ломаных (растяжение – кручение) при различных длинах сегментов ломаных и углах излома от 30 до 180°. Для теоретического исследования использована модель Линя с модифицированным для учета эффекта Баушингера законом упрочнения. Отмечается, что учет взаимодействия зерен в модели Линя можно рассматривать как упрощенную модификацию модели Кренера, основанной на решении Эшелби для кристалла сферической формы в изотропной матрице. Рассмотрены плоские траектории деформации, пластические сдвиги осуществ-

ляются в одной плоскости по трем направлениям (6 систем скольжения), образующим равносторонний треугольник. Описан алгоритм реализации модели и полученные результаты; показано хорошее качественное соответствие расчетных и экспериментальных результатов.

Развитие рассмотренной модели [45] содержится в работах [24, 44], в которых особое внимание уделяется законам упрочнения для СС и описанию эволюционирующей поверхности текучести. В качестве поверхностей текучести приняты поверхности равных уровней интенсивности пластических деформаций по лучевым траекториям деформаций из текущих точек полной разгрузки; «допуск» на пластические деформации принимался равным 0,02, 0,05, 0,2, 0,5 и 1,0 %. Приведены основные гипотезы модели Линя; представляет интерес предложенный авторами закон упрочнения, являющийся модификацией закона Тейлора (позднее аналогичная модификация рассмотрена Венгом):

$$d\tau_c^{(k)} = H_{kl} d\gamma^{(l)}, \quad (19)$$

где $H_{kl} = A + B(\tau_{cs}^{(k)} - \tau_c^{(k)})$ при $Q_{kl} = 1$; $H_{kl} = A - B(E\tau_{cs}^{(k)} + \tau_c^{(k)})$ при $Q_{kl} = -1$; $H_{kl} = A$ при $-1 < Q_{kl} < +1$; $Q_{kl} = (\mathbf{m}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}) : (\mathbf{n}^{(l)} \mathbf{m}^{(l)})$, E – безразмерный параметр.

Нетрудно видеть, что в предлагаемом законе учтены различие активного и латентного упрочнения и разупрочнение при реверсивном нагружении (за счет аннигиляции дислокаций). Предлагаемый закон упрочнения позволяет описать эффект Баушингера и экспериментально наблюдаемый факт «скругления» участка кривой реверсивного нагружения перед наступлением вторичной пластической деформации.

Для упрощения осуществлен переход к плоской задаче; для выбранной декартовой ортогональной системы координат $Ox^1 x^2 x^3$ принимается, что деформирование осуществляется сдвигом в плоскости $Ox^1 x^2$ по трем равнонаклоненным направлениям скольжения. В рассмотрение включены только сдвиговые деформации e_{31} , e_{32} и соответствующие компоненты сдвиговых напряжений (или девиаторов напряжений) S_{31} , S_{32} , которым в соответствие ставятся двумерные векторы деформаций и напряжений.

В расчетах использованы следующие значения параметров: $A = 5,9 \cdot 10^2$ МПа, $B = 2,0 \cdot 10^2$, $E = 0,5$, модуль сдвига $G = 29,4$ ГПа, начальное критическое напряжение сдвига равно 79,2 МПа, что соответствует латуни.

Рассмотрена эволюция поверхности текучести для случая лучевого нагружения при различных допусках на пластическую деформацию; показано, что чем больше величина допуска, тем ближе форма поверхности текучести в данном случае двумерного нагружения к окружности. Сопоставление теоретических результатов с экспериментальными данными показывает хорошее качественное соответствие при всех величинах допуска, количественное соответствие тем лучше, чем больше величина допуска. По сопоставлению с экспериментом возникает вопрос: эксперименты проводились по растяжению–кручению трубчатых образцов, модель же ориентирована на сдвиг в двух перпендикулярных направлениях. Авторы не поясняют переход от сдвиговых компонент к реализующимся в эксперименте. Приведены результаты расчетов эволюционирующей поверхности текучести для двух- и трехзвенных ломаных с углами излома 90° . На трехзвенных ломаных показывается справедливость принципа затухающей памяти: на симметричных траекториях деформации получено одинаковое расположение и размеры поверхностей текучести по отношению к внутренней геометрии траекторий деформации.

Дальнейшее развитие модели Линя связано в значительной мере с модификацией положенного в его основу закона упругости и с учетом геометрической нелинейности. Работ по данной теме чрезвычайно много, в связи с чем остановимся только на нескольких из них, содержащих достаточно полное изложение теории и алгоритмов.

В статье [35] рассматривается геометрически нелинейная модель термоупругопластичности моно- и поликристаллов. Последовательно излагаются кинематические соотношения, основанные, как и большинство других моделей геометрически нелинейной пластичности, на мультипликативном разложении Ли градиента места (подробнее разложение рассмотрено ниже). Кроме того, вводится разложение градиента места, упругой и пластической составляющих на шаровую и унимодулярную части. На основе разложения Ли в терминах промежуточной (разгруженной) конфигурации получено аддитивное разложение градиента скорости перемещений на упругую и пластическую составляющие.

В качестве соотношений термоупругости принимается закон гиперупругости («неогуковский» изотропный закон), получаемый из неравенства Клаузиуса–Планка. При этом функция свободной энергии Гельмгольца полагается зависящей от упругой составляющей градиен-

та места, температуры и скалярной внутренней переменной, характеризующей осредненные поля микродеформаций, обусловленные дефектами кристаллической решетки. В качестве переменной, сопряженной с введенной внутренней переменной, вводится микронапряжение, получено эволюционное уравнение для него.

В части определения пластических деформаций предлагаемая модель не отличается от описанной выше модели Линя, за исключением учета изменения векторов нормали и направления скольжения кристаллографической СС, при этом преобразование векторов осуществляется с использованием упругой составляющей градиента места. В рассматриваемой работе автор ограничился случаем монокристаллического тела, реализация модели для поликристаллов не рассматривается.

Значительное место в работе уделяется алгоритмам численной реализации модели, в основу которых положены метод конечных элементов, неявная схема интегрирования Эйлера, методы нелинейного программирования, расщепление исходной связанной задачи термоупругопластичности на совокупность задачи упругопластичности и температурной задачи. Приведены численные результаты анализа поведения монокристалла при простом сдвиге и при одноосном растяжении прямоугольной полосы с образованием шейки.

Современному изложению физической теории (типа модели Линя) и некоторым аспектам ее численной реализации посвящена работа [34]. В качестве кинематической основы используется мультипликативное разложение транспонированного градиента места («градиента деформации») $\mathbf{f} = \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r}^T$ на упругую \mathbf{f}^e и пластическую \mathbf{f}^p составляющие (заметим, что указанное разложение было введено независимо в работах [14, 25, 28, 29]; представляет интерес обсуждение физической основы данного разложения, содержащееся в [17]):

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p, \quad (20)$$

на макроуровне применяется аналогичное разложение.

Следует отметить, что в ряде работ (см., например, статью [39] и содержащиеся в ней ссылки) обращается внимание на неоднозначность выбора промежуточной (разгруженной) конфигурации, которая получается из актуальной разгрузкой материальной частицы. С математической точки зрения это очевидно: в (20) можно ввести произведение произвольного ортогонального тензора \mathbf{R} на транспонированный к не-

му $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p \equiv \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{f}^p = (\mathbf{f}^e \cdot \mathbf{R}^T)(\mathbf{R} \cdot \mathbf{f}^p) = \widehat{\mathbf{f}}^e \cdot \widehat{\mathbf{f}}^p$. В связи с этим в цитируемой статье предлагается ввести еще одну фиктивную – так называемую изоклинную – конфигурацию, для которой сохраняются неизменными во времени и в пространстве векторы «директоров», в качестве каковых для кристаллитов (зерен, субзерен) могут быть выбраны определенные кристаллографические направления. Разгруженная конфигурация получается трансляцией и поворотом как жесткого целого изоклиной конфигурации.

Из соотношения (20) легко получаются уравнения скоростного типа:

$$\begin{aligned} \mathbf{l} &= \overset{\text{об}}{\widehat{\nabla}} \mathbf{v}^T = \mathbf{d} + \mathbf{w} = \dot{\mathbf{f}} \cdot \mathbf{f}^{-1} = \dot{\mathbf{f}}^e \mathbf{f}^{e-1} + \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1} = \\ &= \mathbf{l}^e + \mathbf{l}^p = \mathbf{w} + \mathbf{w}^e + \mathbf{d}^e + \mathbf{l}^p, \end{aligned} \quad (21)$$

где $\mathbf{w} = \dot{\mathbf{R}}^e \cdot \mathbf{R}^{eT}$ – тензор скорости жесткого поворота решетки, \mathbf{w}^e – спин, ассоциированный с упругим искажением решетки, которым в данной работе пренебрегается. Далее принимается, что

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{l}}^p &\equiv \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}_0^{(k)} \mathbf{n}_0^{(k)}, \\ \mathbf{l}^p &\equiv \mathbf{f}^e \cdot \dot{\mathbf{f}}^p \cdot \mathbf{f}^{p-1} \cdot \mathbf{f}^{e-1} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} = \mathbf{d}^p + \mathbf{w}^p, \end{aligned} \quad (22)$$

где K – количество активных СС, $\mathbf{b}_0^{(k)}, \mathbf{n}_0^{(k)}$ – единичные векторы направления скольжения и нормали к плоскости скольжения в промежуточной (разгруженной) конфигурации, $\mathbf{b}^{(k)}, \mathbf{n}^{(k)}$ – те же векторы в актуальной конфигурации, $\mathbf{b}^{(k)} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{b}_0^{(k)} \approx \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{b}_0^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{n}_0^{(k)} \approx \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{n}_0^{(k)}$ в предположении малых упругих искажений.

На системах скольжения используется закон Шмида в сочетании с комбинированным законом упрочнения:

$$f^{(k)} = \left| \tau^{(k)} - \rho^{(k)} \right| - \tau_c^{(k)} \geq 0, \quad (23)$$

$\tau^{(k)} = \mathbf{m}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}$ – сдвиговое напряжение на системе k , $\tau_c^{(k)}, \rho^{(k)}$ – характеристики изотропного и кинематического упрочнения; изменение критического напряжения сдвига определяется соотношением

$$\dot{\boldsymbol{\tau}}_c^{(k)} = \sum_{s=1}^K h_s^k |\dot{\gamma}^{(s)}|, \quad (24)$$

где h_s^k – матрица упрочнения, учитывающая активное и латентное упрочнение. В качестве мер напряжений и упругих деформаций использованы соответственно второй тензор Пиола–Кирхгоффа $\boldsymbol{\kappa}$ и тензор Коши–Грина \mathbf{c} (с разгруженной конфигурацией в качестве отсчетной, что в дальнейшем обозначается нижним индексом \times), связанные линейным анизотропным упругим законом (анизотропная гиперупругость):

$$\boldsymbol{\kappa}_\times = \boldsymbol{\pi} : \mathbf{c}_\times, \quad \boldsymbol{\kappa}_\times = \det(\mathbf{f}^e) \mathbf{f}^{e-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{f}^{eT}, \quad \mathbf{c}_\times = \frac{1}{2} (\mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^{eT} - \mathbf{E}). \quad (25)$$

Обращаясь к процедуре определения активных систем и скоростей сдвигов, авторы отмечают трудности, возникающие в моделях типа Тейлора–Бишопа–Хилла, часть из которых освещена выше. В связи с этим излагается так называемый А–К-метод (Anand–Kothari method) [12]. В методе используется гипопругий закон:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\pi} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p), \quad (26)$$

где $\mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^K |\dot{\gamma}^{(k)}| \mathbf{m}^{(k)} \operatorname{sgn}(\tau^{(k)})$. Используя далее закон Шмида в скоростях, соотношение (24), два последних соотношения и связь скорости касательного напряжения со скоростью тензора напряжений Коши $\dot{\boldsymbol{\tau}}^{(k)} = \mathbf{m}^{(k)} : \dot{\boldsymbol{\sigma}}$, получают систему уравнений относительно скоростей сдвига. Используя упругий предиктор, определяют системы скольжения, которые могут быть активными (не более пяти), после чего для выбранных активных СС решается полученная система уравнений. В случае если полученные скорости сдвигов на некоторых из СС отрицательны, эти СС исключаются из числа активных и для оставшихся активных СС вновь решается указанная выше система уравнений, из которой определяются скорости сдвигов. Следует отметить, что в данной части процедура весьма близка к предложенной в модели Линя [4]. После завершения данного этапа окончательно определяются напряжения, для чего применяется соотношение (25), что представляется непоследовательным и требующим дополнительной проверки выполнения закона Шмида.

Авторами предлагается собственная процедура определения активных систем скольжения и скоростей сдвигов, названная М–М (McGinty–McDowell)-алгоритмом, основанная на условии совместности: изображающая точка в пространстве напряжений (ИТН) должна находиться в течение шага нагружения на грани или ребрах многогранника текучести. На этапе определения активных систем последние фиксируются, поворот определяется на этапе пересчета напряжений, в связи с чем на первом этапе отсутствует различие между коротационной и материальной производной тензора напряжений.

В процедуре предлагается последовательно определять активируемые СС. В начальной точке ИТН находится внутри многогранника текучести, скорость напряжений определяется соотношением (26) при $\mathbf{d}^p = \mathbf{0}$, из условия равенства сдвигового напряжения критическому напряжению определяется приращение времени, соответствующее моменту достижения ИТН первой грани многогранника текучести. В дальнейшем ИТН может перемещаться только вдоль этой грани до достижения следующей грани, процедура определения точки пересечения с ней аналогична предшествующему этапу: точка пересечения с первой гранью принимается за начальную, из (26) определяется скорость напряжений (скорость пластических деформаций определяется скоростью сдвига по первой СС, процедура определения скорости сдвига описана ниже), определяется промежуток времени до пересечения со второй гранью многогранника текучести. Аналогичным образом определяются 3, 4 и 5-я активные СС; при этом в случае наличия более пяти активных СС в вершинах многогранника текучести независимых СС может быть только пять. Отмечается, что определение сразу нескольких активных СС может привести к ошибке: если направление $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ первого (упругого) шага пересекает вначале первую и затем некоторую k -ю грань, то после пересечения первой грани направление $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ может резко измениться, и следующая активная СС может оказаться совсем иной, не совпадающей с k -й. Подчеркивается, что для определения каждой вновь активируемой СС не требуется знания скорости сдвига в ней.

После определения очередной активной СС устанавливаются скорости сдвига во всех активных СС. Для этого существуют два альтернативных варианта. Наиболее строгим и точным авторы считают использование условия совместности напряжений, определяемых по гиперупругому закону (25), в сочетании с неявной схемой интегрирования.

Второй путь – использование гипотезы закона (26) и условия совместности напряжений, которое можно переписать в следующем виде:

$$\sum_{k=1}^K \left[h_k^r \text{sign} \tau^{(k)} \text{sign} \tau^{(r)} + \mathbf{m}^{(r)} : \boldsymbol{\pi} : \mathbf{m}^{(k)} \right] \dot{\gamma}^{(k)} = \mathbf{m}^{(r)} : \boldsymbol{\pi} : \mathbf{d}, \quad r = \overline{1, K}. \quad (27)$$

При этом с учетом того, что модули упрочнения на 2–3 порядка меньше упругих модулей, первым членом под знаком суммы можно пренебречь; в этом случае в силу симметрии матрицы коэффициентов полученной системы линейных алгебраических уравнений можно использовать, например, схему разложения Холецкого; тогда при неизменности активных СС можно делать только обратный ход на нескольких последовательных шагах нагружения. В случае изотропии упругого закона соотношение (27) не зависит от модулей упругости; отмечается, что при анизотропном законе в соотношении (27) остаются только отношения упругих модулей.

Следующий этап алгоритма – определение напряжений. В случае если активными являются пять СС, девиатор напряжений (или его приращение) легко определяются из пяти условий закона Шмида, шаровая часть тензора напряжений Коши находится из линейной связи со средней деформацией. Ситуация осложняется, если число активных СС менее пяти. В этом случае авторами предлагается использовать принцип минимума приращения девиатора напряжений (по модулю) при условии выполнения условий совместности по напряжениям. Формулируется функционал, в который условие совместности входит через множители Лагранжа, приведено решение задачи минимизации. Следует отметить, что обоснование указанного принципа отсутствует; в дальнейшем приведены некоторые соображения о его согласованности с постулатом Друккера. Несмотря на существенное сходство данного алгоритма с моделью Линя, в этой части М–М-алгоритм существенно отличается от модели Линя, и, как представляется, это отличие – не в пользу М–М-алгоритма. Действительно, модель Линя позволяет находить приращения тензора напряжений на каждом шаге нагружения непосредственно из закона Гука, без введения дополнительных предположений.

Поскольку все указанные величины определяются в начальном положении СС, тогда как последние испытывают при деформировании

повороты, требуется итерационная процедура для установления положения CC на конец шага и уточнения всех искомым величин. Вопрос о ротации КСК отдельно не обсуждается, но, судя по кратким замечаниям, повороты определяются согласно полностью стесненной модели Тейлора, т.е. по антисимметричной части тензора сдвигов. Отмечается, что итерационная процедура сходится очень быстро, за 2–3 итерации.

Значительная часть работы посвящена сопоставлению результатов расчетов для монокристаллов и поликристаллов с ГЦК-решеткой (медь) по А–К-методу и М–М-алгоритму. Рассматриваются несколько законов упрочнения. Отмечается хорошее соответствие результатов для одноосного сжатия и простого сдвига по кривой эффективное напряжение – эффективная деформация, числу активных систем скольжения и величине сдвигов в них. Однако М–М-алгоритм оказывается намного более эффективным, потребное время решения на два порядка меньше, чем при применении А–К-метода. Приведены также результаты сравнения результатов кривых эффективное напряжение – эффективная деформация для одноосного сжатия и простого сдвига поликристаллических медных образцов, полученных с применением предлагаемого алгоритма и полностью неявного алгоритма, предложенного в работе [18]; соответствие результатов также является удовлетворительным.

Отдельно рассматривается вопрос о включении в закон упрочнения остаточных микронапряжений (кинематического упрочнения), приведены модифицированные с использованием последнего соотношения. Приведены критерии разгрузки и продолжающегося активного нагружения.

Физические теории упругопластичности позволяют не только получать информацию о сдвигах по CC и поворотах кристаллической решетки зерен, но исследовать формирование и эволюцию дислокационных субструктур; один из вариантов такого типа моделей представлен в статье [38]. В первой части цитируемой работы приведена вариационная постановка задачи упругопластичности, рассмотрен ее инкрементальный вариант. Предлагаемая формулировка в дальнейшем применена для физической теории упругопластичности; отмечается потеря выпуклости функционала вариационной постановки («псевдоупругого потенциала») при кинематическом разупрочнении (вследствие вращения решетки) и учета латентного упрочнения. В то же время известные экспериментальные данные свидетельствуют о существова-

нии в кристаллитах областей, деформируемых одиночным скольжением и отделенных друг от друга тонкими прослойками дислокационных субструктур (плоскими скоплениями, стенками и др.). В предлагаемой модели переход к локальному одиночному скольжению («пятнистому сдвигу») и образование тонкой микроструктуры связывается с потерей выпуклости потенциала вследствие латентного упрочнения.

В работе используется мультипликативное разложение градиента места, $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p$; скорость изменения пластической составляющей $\dot{\mathbf{f}}^p$ определяется скоростями сдвигов по СС. Следуя [37], вводится тензор плотности дислокаций \mathbf{p} , который определяется через \mathbf{f}^p , $\mathbf{p} = \mathbf{f}^p \times \overset{\circ}{\nabla}$, который в конечном счете выражается через сдвиги по СС. Кристаллит далее рассматривается как области однородно деформируемого материала (пластическое деформирование реализуется однородным одиночным сдвигом), отделенные тонкими прослойками – границами. В границах упругая и пластическая составляющая градиента места терпит разрыв, градиент места \mathbf{f} удовлетворяет условиям совместности в слабом смысле (почти всюду, кроме прослоек, где градиент места может испытывать разрыв по сдвигам вдоль границы). По величине разрыва пластической составляющей градиента места с помощью приведенного выше соотношения устанавливается плотность дислокаций в прослойке; таким образом, граница представляется дипольной стенкой дислокаций, принадлежащих двум СС по обе стороны от прослойки.

Предусматривается возможность образования многоуровневых границ-прослоек, для чего используется модель бинарного дерева (ветвящегося графа, из каждого узла исходят либо 2, либо 0 ветвей; градиент места в узлах равен среднему градиентов места, приписанных ветвям; на нулевом уровне («корне») градиент места равен среднему для кристаллита). Наличие многоуровневых прослоек, в которых допускается сдвиг, позволяет при их достаточном количестве обеспечить любую предписанную деформацию за счет одиночных сдвигов. Приведены примеры определения различно ориентированных границ в ГЦК-кристаллах, которые согласуются с экспериментально наблюдаемыми субструктурами при различных видах нагружения. В заключительной части статьи приведен способ внесения в модель абсолютных масштабов тонкой структуры, основанный на введении в полную энергию аддитивной добавки от собственной энергии дислокаций; приведены примеры вычисления размеров ячеек дислокационных субструктур,

результаты находятся в хорошем качественном и количественном соответствии с экспериментальными данными.

В статье [23] рассматривается упругопластическая модель для описания деформирования материалов с ГПУ-решеткой, где наряду со сдвиговой модой деформирования учитывается двойникование. Используется мультипликативное разложение градиента места, повороты решетки описываются ортогональным тензором, входящим в полярное разложение упругой составляющей градиента места. В отличие от большинства работ, в которых оперируют дискретными наборами ориентаций решеток монокристаллов (зерен), образующих поликристаллический агрегат, в работе используется континуальное представление функции распределения ориентаций (ФРО), для которой формулируется эволюционное уравнение балансового типа.

Модель применена для расчетов кривых интенсивность напряжений–интенсивность деформаций и эволюции ФРО при стесненной осадке и простом сдвиге титановых образцов и свободной осадке магниевого сплава. Результаты расчетов находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными и результатами расчетов, полученных с использованием других моделей (работающих с дискретными наборами ориентаций).

Одним из наиболее важных вопросов физических теорий является установление (или выбор) модели для описания ротаций кристаллической решетки. В работе [11] рассматриваются две наиболее часто используемые модели поворота кристаллической решетки при упругопластическом деформировании: модель стесненного поворота по Тейлору, определяющая спин решетки как разность тензора вихря и антисимметричной части тензора скорости пластических сдвигов, и модель, связывающая поворот решетки с материальным поворотом, определяемым ортогональным тензором, сопровождающим упругую деформацию. Вводятся следующие обозначения:

$$\mathbf{\Omega}_1 = \mathbf{w} - \mathbf{w}^p = \mathbf{w} + \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i), \quad (28)$$

где \mathbf{w} – тензор вихря, $\mathbf{w} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{1}^T)$, $\mathbf{1}$ – градиент скорости перемещений. Спин $\mathbf{\Omega}_1$ служит для определения ротации кристаллической решетки зерна по Тейлору.

Для рассмотрения «материального» поворота вводится расширенная гипотеза Фойгта, предполагающая однородность градиентов деформации на макро- и мезоуровне $\mathbf{f} = \mathbf{F}$ (или градиентов скоростей перемещений $\mathbf{l} = \mathbf{L}$). Материальный поворот связывается с ортогональным тензором \mathbf{r}^e , сопровождающим упругую деформацию (называемым также тензором ротации):

$$\mathbf{f}^e = \mathbf{r}^e \cdot \mathbf{u}^e = \mathbf{v}^e \cdot \mathbf{r}^e, \quad (29)$$

где \mathbf{f}^e – упругая составляющая градиента деформации. В результате воздействия (деформирования) произвольное зерно с некоторой ориентацией испытывает пластические сдвиги (без изменения ориентации решетки), упругие искажения и повороты; с последними связывается квазитвердое движение (конечные повороты как жесткого целого), которое, в свою очередь, в рамках рассматриваемой модели и описывает поворот решетки зерна; скорость поворота (спин), определяемый по \mathbf{r}^e , обозначается как $\mathbf{\Omega}_2$.

Рассмотрено приближение квазистатического нагружения, показано, что в этом случае тензор спина «материального» поворота решетки имеет вид

$$\mathbf{\Omega}_2 = \mathbf{w}^e = \mathbf{w} - \mathbf{w}^p - (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \mathbf{d}^p + \mathbf{d}^p \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}), \quad (30)$$

где \mathbf{B} – тензор четвертого ранга упругой податливости. Показано, что при квазистатическом деформировании рассмотренные модели поворотов решетки в силу малости упругих деформаций $\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}$ будут давать незначительно отличающиеся результаты.

Тем не менее в работе отмечается, что в обеих моделях, широко применяемых для моделирования текстурообразования в поликристаллах, никак не учитываются механизмы взаимодействия; по существу, зерна рассматриваются обособленно. В то же время физически очевидно и экспериментально показано, что существенную роль в поворотах играет несовместность скольжения дислокаций в соседних зернах. В учете данного (и некоторых других) механизма авторы работы видят развитие моделей текстурообразования.

Библиографический список

1. Волегов П.С., Никитюк А.С., Янц А.Ю. Геометрия поверхности текучести и законы упрочнения в физических теориях пластичности // Вестник ПГТУ. Математическое моделирование систем и процессов. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2009. – № 17. – С. 25–33.

2. Зубчанинов В.Г. Основы теории упругости и пластичности. – М.: Высшая школа. – 1990. – 368 с.
3. Качанов Л.М. Основы теории пластичности. – М.: Наука. – 1969. – 420 с.
4. Линь Т.Г. Физическая теория пластичности // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. Вып.7. – М.: Мир, 1976. – С.7–68.
5. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука. 1986. – 232 с.
6. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Metallurgia. – 1986. – 224 с.
7. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории упругопластичности // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, № 3. – С. 21–30.
8. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. – Т. 15, № 3. – С. 327–344.
9. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Сер. Физико-математические науки. – 2010. – № 2 (98). – С. 110–119.
10. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория определяющих соотношений. Ч.2. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та. – 2008. – 243 с.
11. Швейкин А.И., Ашихмин В.Н., Трусов П.В. О моделях ротации решетки при деформировании металлов // Вестник ПГТУ. Механика. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та, 2010. – № 1. – С. 111–127.
12. Anand L., Kothari M. A computational procedure for rate-independent crystal plasticity // J. of the Mechanics and Physics of Solids. – 1996. – Vol. 44. – No. 4. – P. 525–558.
13. Plastic incompatibility stresses and stored elastic energy in plastically deformed copper / A. Baczmanski, N. Hfaiedh, M. François, K. Wierzbanski // Mater. Sci. Eng. – 2009. – A. 501. – P. 153–165.
14. Bilby B.A., Gardner L.R.T., Stroh A.N. Continuous distributions of dislocations and the theory of plasticity // In: Proc. 9th Int. Congr. Appl.

Mech. Bruxelles, 1956. – Universiter de Bruxelles. – 1957. – Vol. 8. – P. 35–44.

15. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses// *Phil. Mag. Ser.7.* – 1951. – Vol.42. – No. 327. – P. 414–427.

16. Bishop J.F.W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face – centered metal// *Phil. Mag. Ser.7.* – 1951. – Vol. 42. – No. 334. – P. 1298–1307.

17. Clayton J.D., McDowell D.L. A multiscale multiplicative decomposition for elastoplasticity of polycrystals // *Int. J. Plasticity.* – 2003. – Vol. 19 – P. 1401–1444.

18. Cuitino A.M., Ortiz M. Computational modeling of single crystals // *Modeling and Simulation in Material Science and Engineering.* – 1992. – Vol. 1. – P. 225–263.

19. Demir E. A Taylor-based plasticity model for orthogonal machining of single-crystal FCC materials including frictional effects // *Int J Adv Manuf. Technol.* – 2009. – Vol. 40. – P. 847–856.

20. Gambin W. A model of rigid – ideally plastic crystal // *J. Tech. Phys.* – 1987. – Vol. 28. – No. 3. – P. 309–326.

21. Habraken A.M. Modelling the plastic anisotropy of metals // *Arch. Comput. Meth. Engng.* – 2004. – 11. – No. 1. – P. 3–96.

22. Havner K.S. Analysis of fcc crystals in two singular orientations in (1 1 0) channel die compression // *Mech. of Mater.* – 2010. – Vol. 42. – P. 657–672.

23. Kouchmeshky B., Zabarás N. Modeling the response of HCP polycrystals deforming by slip and twinning using a finite element representation of the orientation space // *Comput. mater. sci.* – 2009. – Vol. 45. – P. 1043–1051.

24. Kratochvil J., Tokuda M. Plastic response of polycrystalline metals subjected to complex deformation history // *Trans. ASME. J. Engng. Mater. Technol.* – 1984. – Vol. 106. – P. 299–303.

25. Kroner E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen // *Arch. Rational Mech. Anal.* – 1960. – B. 4.– S. 273–334.

26. Deformation bands, the LEEDS theory, and their importance in texture development: Part I. Previous evidence and new observations / D. Kuhlman-Wilsdorf, S.S. Kulkarni, J.T. Moore, E.A. Starke // *Metallurgical and Mater. Trans. A.* – 1999. –Vol. 30A.– P. 2491–2501.

27. Lebensohn R.A., Tomé C.N. A self-consistent anisotropic approach // *Acta Metall.* – 1993. – Vol. 41. – P. 2611–2624.
28. Lee E.H., Liu D.T. Elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis // *J. Appl. Phys.* – 1967. – Vol. 38. – P. 19–27.
29. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain // *ASME J. Appl. Mech.* – 1969. – Vol. 36. – P. 1–6.
30. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face – centered cubic crystal // *J. Mech. Phys. Solids.* – 1957. – Vol. 5. – No. 1. – P.143–149.
31. M’Guil S., Ahzil S., Khaleel M.A. An intermediate viscoplastic model for deformation texture evolution in polycrystals // *Proceed. ICOTOM 14. Leuven. – Belgium. 2005.* – P. 989–994.
32. Mareau C., Favier V., Berveiller M. Micromechanical modeling coupling time-independent and time-dependent behaviors for heterogeneous materials // *Int. J. Solids and Structures.* – 2009. – Vol. 46. – P. 223–237.
33. Masima M. und Sachs G.O. Mechanische Eigenschaften von Messingkristallen // *Z. Physik.* – 1928. – B. 50. – S. 161–186.
34. McGinty R.D., McDowell D.L. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity // *Int. J. Plasticity.* – 2006. – Vol. 22. – P. 996–1025.
35. Miehe C. Multisurface thermoplasticity for single crystals at large strains in terms of Eulerian vector updates// *Int. J. Solids and Struct.* – 1996. – Vol. 33. – No. 20–22. – P. 3103–3130.
36. Modeling lattice strain evolution at finite strains and experimental verification for copper and stainless steel using in situ neutron diffraction / C.J. Neil, J.A. Wollmershauser, B. Clausen, C.N. Tomé, S.R. Agnew // *Int. J. Plasticity.* – 2010, doi:10.1016 / j.ijplas.2010.03.005.
37. Nye J.F. Some geometrical relations in dislocated crystals // *Acta Metall.* – 1953. – Vol. 1. – P. 153–162.
38. Ortiz M., Repetto E.A. Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids.* – 1999. – Vol. 49. – P. 397–462.
39. Polizzotto C. A nonlocal strain gradient plasticity theory for finite deformations // *Int.J. Plasticity.* – 2009. – doi:10.1016/j.ijplas.2008.09.009.
40. Radi M., Abdul-Latif A. Grain shape effect on the biaxial elastic-inelastic behavior of polycrystals with a self-consistent approach // *Proc. Eng.* – 2009. – Vol. 1. – P. 13–16.

41. Taylor G.I. Plastic strain in metals // J. Inst. Metals. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.
42. 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.
43. Taylor G.I., Elam C.F. The plastic extension and fracture of aluminium crystals // Proc. Roy. Soc. (London). – 1925. – Ser. A 108. – P. 28–51.
44. Tokuda M., Kratochvil J. Prediction of subsequent yield surface by a simple mechanical model of polycrystal // Arch. Mech. – 1984. – Vol. 36. – No. 5–6. – P. 661–672.
45. Tokuda M., Kratochvil J., Ohashi Y. On mechanism of induced plastic anisotropy of polycrystalline metals // Bull. JSME. – 1982. – Vol. 25. – No. 208. – P. 1491–1497.
46. Trusov P.V., Volegov P.S. Internal variable constitutive relations and their application to description of hardening in single crystals // Physical Mesomechanics. – 2010. – Vol. 13, Is. 3–4. – P. 152–158.
47. Slip system based model for work hardening of aluminium, including transient effects during strain path changes / S. Van Boxel, M. Seeffeldt, B. Verlinden, P. Van Houtte // Вопросы материаловедения. – 2007. – № 4 (52). – С. 111–117.
48. Weng G.J. Dislocation theories of work hardening and yield surfaces of single crystals // Acta Mechanica. – 1980. – Vol. 37. – No. 3–4. – P. 217–230.
49. Weng G.J. The yield surface of single crystals at arbitrary strain // Acta Mechanica. – 1980. – Vol. 37. – No. 3–4. – P. 231–245.

Получено 21.03.2011