

## **ДВУХУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ГПУ-МЕТАЛЛОВ: УПРОЧНЕНИЕ ДЛЯ ДВОЙНИКОВ**

Рассматривается двухуровневая модель, ориентированная на описание процессов неупругого деформирования ГПУ-металлов. Двойникование является одним из наиболее важных механизмов пластического деформирования ГПУ-металлов. В работе рассматривается взаимовлияние двойников различных систем с учетом их взаимной ориентации, описываемое эволюционным уравнением для критического напряжения двойникования (законом упрочнения) за счет роста двойников других систем. Результаты находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.

**Ключевые слова:** двухуровневая упруговязкопластическая модель, ГПУ, двойникование, упрочнение.

В ГПУ-кристаллах механическое двойникование является одним из основных механизмов пластического течения. Экспериментально выявлено, что уже при малых деформациях в ГПУ-кристаллах достаточно высока объемная доля двойников. Так, например, двойниковая фракция в чистом титане, полученном йодистым способом, после обжатия на 5 % при комнатной температуре составляет более 30 % [1]. При этом отмечено, что двойники одних систем могут быть препятствием для двойников других систем, поэтому объемная доля двойников в кристаллах, как правило, не превышает для различных материалов 20–80 %.

При построении математических моделей процессов деформирования конструкционных материалов крайне важно учитывать особенности их внутреннего строения. В соответствии с вышесказанным необходимо введение закона упрочнения для двойникования, позволяющего учесть особенности процессов деформирования ГПУ-металлов.

Рассмотрим существующие способы ограничения объемной доли двойников в кристаллитах (зернах, субзернах).

1. Введение функции Хэвисайда в соотношение для скорости роста объемной доли двойников (например [2]):

$$\dot{f}^\beta = \begin{cases} H \left( f_s - \sum_k f^k \right) \frac{\dot{\gamma}_{tw}^\beta}{\gamma_{tw}^\beta} \left( \frac{s^{(\beta)}}{s_c^{(\beta)}} \right)^{\frac{1}{m}}, & s^{(\beta)} \geq 0; \\ 0, & s^{(\beta)} \leq 0, \end{cases} \quad (1)$$

где  $\dot{\gamma}_{tw}$  – параметр материала,  $\gamma_{tw}^\beta$  – величина постоянного сдвига, связанного с двойниковой системой  $\beta$ ,  $\frac{\dot{\gamma}_{tw}^\beta}{\gamma_{tw}^\beta}$  – скорость роста объемной доли двойников при равенстве касательного напряжения критическому,  $s^{(\beta)}$  – касательное напряжение,  $s_c^{(\beta)}$  – критическое напряжение для системы двойникового  $\beta$ ,  $H$  – функция Хэвисайда,  $f^k$  – объемная доля двойников  $k$ -го варианта,  $\sum_k f^k$  – суммарная объемная доля двойников в кристаллите.

При достижении некоторого критического значения  $f_s$  скорость роста объемной доли двойников становится равной нулю, объемная доля двойников далее не увеличивается. Однако при одиночном двойниковании возможна ситуация, когда все зерно переходит в двойник. Поэтому в работе [2] предполагается, что одиночное двойникование может продолжаться при превышении значения насыщения  $f_s$  с некоторой вероятностью. Данный способ не основывается на физических закономерностях, хотя и позволяет описать процесс двойникования.

2. Фрагментация двойникованием [3]: при достижении критического значения  $f_s$  двойники рассматриваются как новые зерна с определенной ориентацией. При этом как в исходном зерне, так и в новых зернах деформирование осуществляется только сдвигами по системам скольжения. Однако физических причин прекращения двойникования в новых зернах нет, что является недостатком данного способа.

Первые два способа являются достаточно простыми в реализации, однако наиболее удачным представляется описание роста объемной доли двойников аналогично сдвигам по системам скольжения, то есть с помощью законов упрочнения.

3. Введение законов упрочнения для систем двойников, аналогичных законам упрочнения для систем скольжения [4–6]. Данный способ позволяет описать процессы двойникования, учитывая физические основы взаимодействия двойников.

Существующие на данный момент законы упрочнения сформулированы в основном для ГЦК- и ОЦК-кристаллов, где двойникование не является основным механизмом пластического деформирования, объемная доля двойников достигает небольших значений по сравнению с ГПУ-кристаллами. При проведении численных экспериментов для деформирования ГПУ-кристаллов было установлено, что такие законы не позволяют количественно описать процессы двойникования ГПУ-металлов: не удастся получить достаточно высокие значения объемной доли двойников при небольших степенях деформирования.

Таким образом, необходимо ввести закон упрочнения, описывающий зависимость от объемной доли двойников таким образом, что упрочнение при значениях объемной доли двойников, существенно меньших  $f_s$ , происходит медленно, однако при приближении к критическому значению скорость упрочнения растет быстро, тем самым не давая объемной доле двойников превысить критического значения. Качественно график подобной зависимости критического напряжения двойникования приведен на рис. 1.

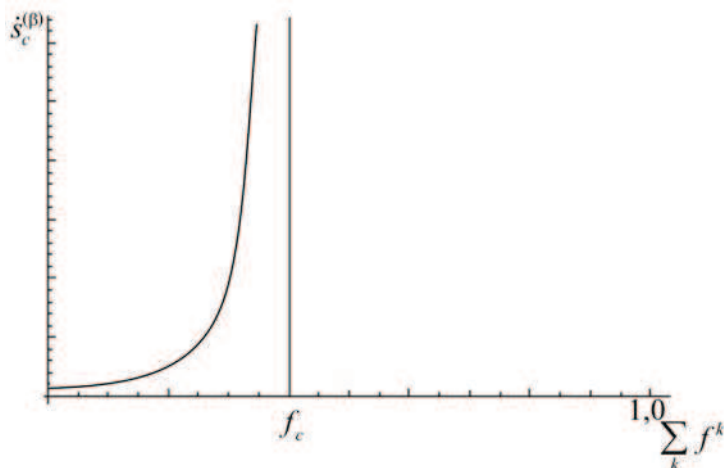


Рис. 1. Схематическое изображение зависимости упрочнения от суммарной объемной доли двойников в кристаллите

В частности, данную зависимость можно описать функцией следующего вида:

$$\dot{\sigma}_c^{(\beta)} \sim \left( \frac{1}{f_s - \sum_k f^k} \right)^a.$$

Таким образом, закон упрочнения для систем двойников (СД) предлагается записать в следующем виде:

$$\dot{s}_c^k = \sum_j^{N_{tw}} \xi^{kj} \left( \frac{1}{f_s - \sum_k f^i} \right)^a h_s^j \gamma_{tw}^j \dot{f}^j. \quad (2)$$

где  $\dot{s}_c^k$  – скорость изменения критического напряжения для двойниковой системы  $k$ ,  $h_s^j$  – модуль упрочнения для системы двойникования, характеризующий влияние  $j$ -й системы двойникования на другие системы,  $\xi^{kj}$  – мера разориентации систем двойников  $k$  и  $j$ , которая будет равна 0 в случае совпадения систем двойников и 1 – в случае, когда единичные нормали  $\mathbf{n}^k$  и  $\mathbf{n}^j$  и векторы Бюргерса  $\mathbf{b}^k$  и  $\mathbf{b}^j$  систем двойников перпендикулярны. Определим меру разориентации следующим образом:

$$\xi^{kj} = 1 - \frac{|\mathbf{b}^k \cdot \mathbf{b}^j| + |\mathbf{n}^k \cdot \mathbf{n}^j|}{2}. \quad (3)$$

Параметры  $a$  и  $h_s^j$  для закона упрочнения (2) предполагается определять совместно как из качественной зависимости объемной доли двойников от накопленных деформаций, так и из количественного соответствия результатов расчета характеристик напряженно-деформированного состояния экспериментальным данным. Для описания влияния двойникования на упрочнение системы скольжения (СС)  $\alpha$  использован закон упрочнения следующего вида [3]:

$$\dot{\tau}_c^\alpha = h_s^{pri} \left( 1 - \frac{\tau_c^\alpha}{\tau_s^\alpha} \right) \sum_k^{N_s^{pri}} |\dot{\gamma}^k| + h_s^{bas} \left( 1 - \frac{\tau_c^\alpha}{\tau_s^\alpha} \right) \sum_l^{N_s^{bas}} |\dot{\gamma}^l| + h_s^{pyr} \left( 1 - \frac{\tau_c^\alpha}{\tau_s^\alpha} \right) \sum_m^{N_s^{pyr}} |\dot{\gamma}^m|, \quad (4)$$

где в зависимости от СС (базисная – *bas*, призматическая – *pri*, пирамидальная – *pyr*) модули упрочнения  $h_s^{pri}$ ,  $h_s^{bas}$ ,  $h_s^{pyr}$  и напряжения насыщения  $\tau_s^\alpha$  определяются следующим образом:

$$h_s^i = h_{so}^i \left( 1 + C \left( \sum_\beta f^\beta \right)^2 \right), \quad (5)$$

$$\tau_s^\alpha = \tau_{so}^\alpha + s_{pr} \left( \sum_\beta f^\beta \right)^{0,5}, \quad (6)$$

значения  $h_{so}^t$  и  $\tau_{so}^\alpha$  – модули внутреннего упрочнения и напряжения насыщения в отсутствие двойникования, определяемые в зависимости от типа системы скольжения ( $t = bas, pri$  или  $pyr$ ),  $N_s^\alpha$  – число активных СС моды  $\alpha$ . Коэффициенты  $C$  и  $s_{pr}$  – параметры упрочнения, описывающие взаимодействие между СС и СД: двойники оказывают существенное влияние на процесс упрочнения, так как границы двойников являются препятствием для движения дислокаций.

Предложенный закон упрочнения был использован в упруговязкопластической модели. Рассмотрим основные положения модели.

На макроуровне в качестве геометрически нелинейного определяющего соотношения используется закон Гука в скоростной форме:

$$\Sigma^r = \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}), \dot{\Sigma} = \mathbf{\Omega} \cdot \Sigma - \Sigma \cdot \mathbf{\Omega} - \mathbf{C} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^{in}), \quad (7)$$

где  $\Sigma$  – тензор напряжений Коши,  $\mathbf{C}$  – тензор модулей упругости,  $\mathbf{D}, \mathbf{D}^{in}$  – тензор деформации скорости и его неупругая составляющая, индекс  $r$  означает коротационную производную,  $\mathbf{\Omega}$  – спин подвижной системы координат, относительно которой определяется собственно деформационное движение. Неупругая составляющая деформации скорости  $\mathbf{D}^{in}$  и эффективные анизотропные упругие свойства  $\mathbf{C}$  являются явными внутренними переменными модели макроуровня, в каждый момент деформирования зависят от структуры и определяются путем осреднения соответствующих характеристик модели мезоуровня.

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

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

где  $\sigma$  – тензор напряжений Коши,  $\mathbf{c}$  – тензор четвертого ранга упругих свойств кристаллита,  $\mathbf{d}, \mathbf{d}^{in}$  – тензор деформации скорости, его упругая и неупругая составляющие,  $\mathbf{w}$  – тензор спина решетки, который определяется согласно модели стесненного поворота Тейлора. Для связи между масштабными уровнями модели применяется гипотеза Фойгта, согласно которой тензоры деформации скорости для зерен совпадают с тензором деформации скорости на макроуровне  $\mathbf{d} = \mathbf{D}$ . Условие со-

гласованности определяющих соотношений макро- и мезоуровней при использовании предположения о связи тензоров упругих свойств, напряжений и деформации скорости вида

$$\mathbf{C} = \langle \mathbf{c} \rangle, \mathbf{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \mathbf{D} = \langle \mathbf{d} \rangle \quad (9)$$

приводят [7] к следующим соотношениям для связи тензоров спина:

$$\boldsymbol{\Omega} = \langle \mathbf{w} \rangle + \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \cdot \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \mathbf{w}' \rangle \quad (10)$$

и неупругой составляющей тензора деформации скорости

$$\mathbf{D}^{in} = \langle \mathbf{d}^{in} \rangle + \mathbf{C}^{-1} : \langle \mathbf{c}' : \mathbf{d}^{in'} \rangle \quad (11)$$

В соотношениях (9)–(11)  $\langle \cdot \rangle$  – оператор осреднения, штрихом  $(\cdot)'$  обозначены отклонения соответствующей величины для кристаллита от средних по представительному объему макроуровня, например  $\mathbf{c} = \langle \mathbf{c} \rangle + \mathbf{c}'$ .

Используемая модель основана на гипотезе Фойгта, т.е. предписанным является тензор деформации скорости. Однако при реализации эксперимента на одноосное нагружение невозможно напрямую задать все компоненты этого тензора, поскольку граничные условия на макроуровне являются смешанными. В связи с этим реализация одноосного нагружения осуществляется следующим образом: предписанной является только одна компонента тензора деформации скорости на макроуровне в лабораторной системе координат (ЛСК), а остальные компоненты определяются в результате решения задачи исходя из необходимости обеспечения соответствующего одноосного напряженного состояния [8]. При этом следует подчеркнуть, что хотя на макроуровне решается одноосная, на мезоуровне требуется анализировать трехмерное деформирование.

С помощью данной модели было проведено моделирование для  $\alpha$ -Ti высокой степени чистоты (доля титана 99,9998 %) с заданной начальной текстурой (рис. 2, б) с использованием приведенных в работе [3] критических напряжений, параметров влияния систем двойников на упругие свойства по системам скольжения:

$$\tau_o^{pri} = 30 \text{ МПа}, \tau_o^{bas} = 150 \text{ МПа}, \tau_o^{pyr} = 120 \text{ МПа}, \tau_o^{tw} = 125 \text{ МПа}, \\ s_{pr} = 100 \text{ МПа}, C = 25.$$

Из условия минимума среднеквадратичного отклонения экспериментальных данных и результатов численного расчета для поликристаллического материала, обладающего начальной текстурой (харак-

терные углы наклона направления  $[0001]$  кристаллита относительно оси  $OX^3$  ЛСК  $20...35^\circ$  (рис. 2, *a*)), при одноосном сжатии вдоль  $OX^3$  фиксированной лабораторной системы координат была проведена идентификация модулей упрочнения и насыщения для систем скольжения, а также параметров закона упрочнения для систем двойников; при этом получены следующие значения:

$$\tau_{so}^{pri} = 200 \text{ МПа}, \tau_{so}^{bas} = 300 \text{ МПа}, \tau_{so}^{pyr} = 150 \text{ МПа};$$

$$h_{so}^{pri} = 150 \text{ МПа}, h_{so}^{bas} = 150 \text{ МПа}, h_{so}^{pyr} = 150 \text{ МПа};$$

$$h_s^{tw} = 100 \text{ МПа}, a = 0,1.$$

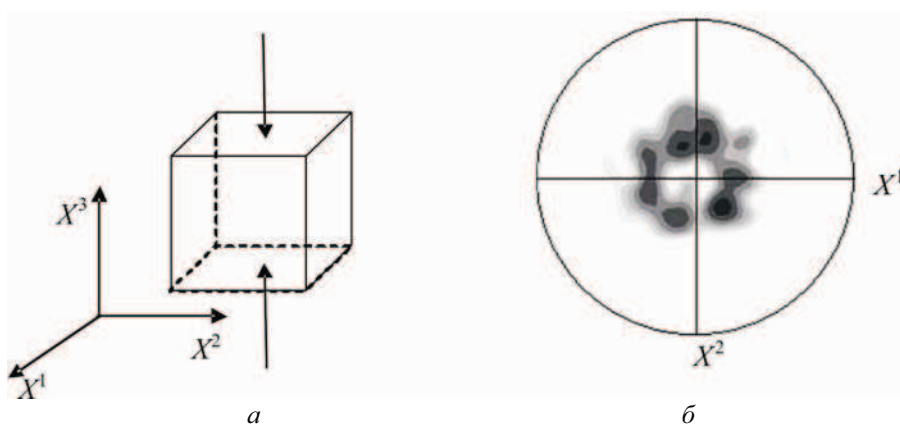


Рис. 2. Эксперимент на одноосное сжатие вдоль  $OX^3$ : *a* – схематичное изображение экспериментальной процедуры одноосного сжатия вдоль  $OX^3$ ; *б* – полюсная фигура вдоль  $OX^3$  для направления  $[0001]$  (экспериментальные данные [3])

На рис. 3 приведена зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций при сжатии образца вдоль оси  $X^3$ . При этом качественно описан эффект повышения напряжений при 20 % сжатии, что невозможно было описать другими законами упрочнения [2–4]. Это связано с тем, что при таких деформациях объемная доля двойников постепенно перестает расти (рис. 4), пластические деформации осуществляются посредством движения дислокаций по системам скольжения, критическое напряжение по которым выше критического напряжения на системах двойников до прекращения роста объемной доли двойников.

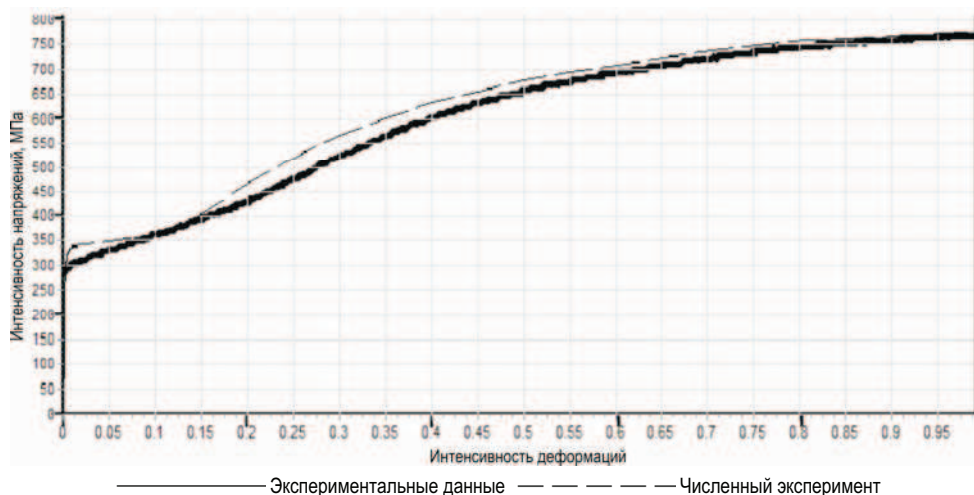


Рис. 3. Сравнение результатов для одноосного сжатия вдоль оси  $X^3$  при скорости деформирования  $0,01 \text{ с}^{-1}$

Как показано на рис. 4, значение объемной доли двойников не превышает 40 %. Это связано с тем, что для ГПУ-решетки невозможно двойникование по одной системе в силу геометрии решетки, происходит упрочнение по системам двойников за счет их взаимного влияния.

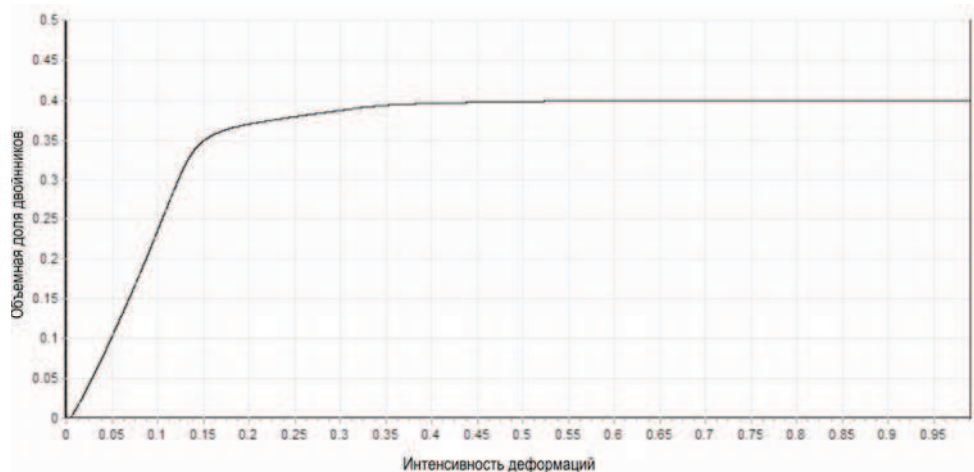


Рис. 4. График зависимости средней объемной доли двойников в кристаллите от накопленных деформаций

Была проведена верификация модели для эксперимента на одноосное сжатие текстурированного образца вдоль другой оси –  $X^1$  (см. рис. 2, а). Полученные в процессе верификации результаты (рис. 5) находятся в удовлетворительном соответствии с экспериментальными данными.



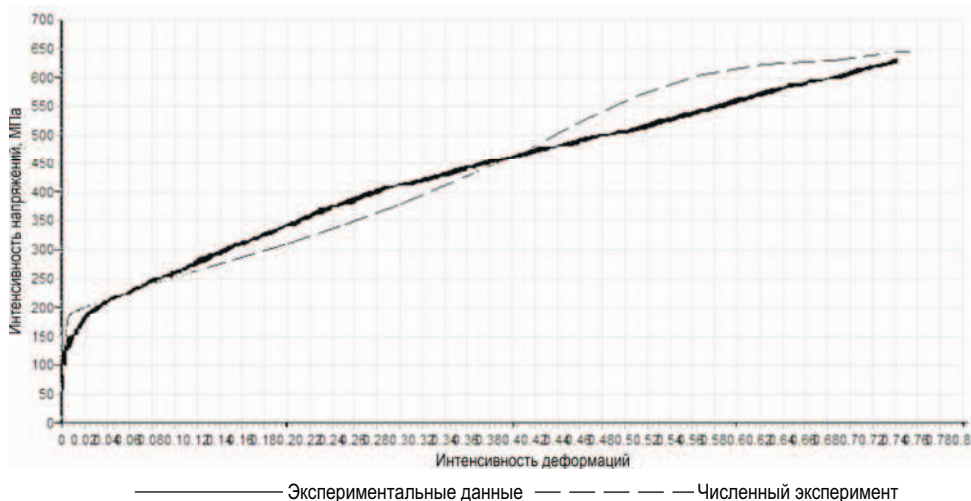


Рис. 5. Сравнение результатов для одноосного сжатия вдоль оси  $X^1$  при скорости деформирования  $0,01 \text{ с}^{-1}$

Предложенный вариант закона упрочнения в отличие от наиболее распространенных законов упрочнения для двойников позволяет более точно описать эффекты, обусловленные механическим двойникованием. Физически результаты соответствуют действительности: в ГПУ-кристаллах двойникование осуществляется быстро, затем приостанавливается, так как двойники одних систем препятствуют распространению двойников других систем. При этом алгоритмически описание двойникования не отличается от описания скольжения дислокаций, что облегчает реализацию программы.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 10-08-00156-а, 10-08-96010-р\_урал\_а).

### Библиографический список

1. Теория образования текстур в металлах и сплавах / Я.Д. Вишняков, А.А. Бабарэко, С.А. Владимиров, И.В. Эгиз. – М: Наука, 1979. – С. 105–130.
2. Kouchmeshky B., Zabaras N. Modeling the response of HCP polycrystals deforming by slip and twinning using a finite element representation of the orientation space // Computational Materials Science. – 2009. – No.45. – P. 1043–1051.
3. Modeling anisotropic stress-strain response and crystallographic texture evolution on  $\alpha$ -titanium during large plastic deformation using Tay-

lor-type models: influence of initial texture and purity / X. Wu, S.R. Kalidindi, C. Necker, A.A. Salem // Metallurgical and materials transactions. – 2008. – Vol. 39A. – P. 3046–3054.

4. Ganapathysubramanian S., Zabaras N. Modeling the thermoelastic-viscoplastic response of polycrystals using continuum representation over orientation space// International Journal of Plasticity – 2005. – Vol. 21. – P. 119–144.

5. Staroselsky A., Anand L. Inelastic deformation of polycrystalline face cubic materials by slip and twinning// J. Mech. Phys. Solids – 1998. – Vol. 46, No. 4. – P. 671–696.

6. Twinning Models in Self-Consistent Texture Simulations of TWIP Steels / A. Prakash, T. Hochrainer, E. Reisacher, H. Riedel // Microstructure Evolution. – 2008. – No. 8. – P. 645–652.

7. Нечаева Е.С., Трусов П.В. Конститутивная модель частично кристаллического полимерного материала. Алгоритм реализации модели мезоуровня // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011. – Т. 4, № 1. – С. 74–89.

8. 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.

Получено 02.07.2011

**O.V. Brazgina, P.V. Trusov**

The Perm national research polytechnic university

## **A TWO-LEVEL MODEL FOR DESCRIPTION ELASTOVISCOPLASTIC DEFORMATION OF HCP-METALS**

A two-level model, which is made for describing deformation processes of hcp metals, is considered. Twinning is one of the most important mechanisms of plastic deformation of hcp-metals. The interference of twins of different systems considering their orientation is described in this work using evolution equation for critical stress (hardening law) due to growth twins of another twin systems. The results satisfactory correspond with experimental data.

**Keywords:** two-scale elastoviscoplastic model, hcp, twinning, hardening.