

В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, П.В. Трусов

Пермский государственный технический университет

КОНСТИТУТИВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ С ВНУТРЕННИМИ ПЕРЕМЕННЫМИ: ОБЩАЯ СТРУКТУРА И ПРИЛОЖЕНИЕ К ТЕКСТУРООБРАЗОВАНИЮ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

Abstract

The approach to construction of defining parities, the evolutionary and closing equations, based on a hypothesis about existence of a final set of the internal tensor variable and physic–mechanical parameters completely describing a condition of a material «here and now» is considered. It allows passing to record of the physical equations in the form of simple parities; thus history of influences it is not neglected, its "carrier" are the entered internal variables. The possible kind of structure constitutive models is discussed. On an example of processes texture formation in FCC poly–crystals construction of physical models in two– dimensional and three–dimensional cases is illustrated.

Построение конститутивных моделей

«Сердцевиной», ключевым звеном математических моделей физико–механических процессов являются конститутивные модели (КМ) исследуемых материалов и процессов. Ошибка в выборе (или формулировке) конститутивных моделей делает всю дальнейшую работу по созданию математической модели (математическую постановку, разработку алгоритмов и программ), как правило, бесполезной. Одним из наиболее эффективных подходов к построению конститутивных моделей (физических уравнений) в последние десятилетия стал аксиоматический подход. Наиболее развитой в механике сплошных сред (МСС) к настоящему времени является аксиоматика У.Нолла – А.А.Ильюшина [3,4, 11, 12].

Следует отметить, что аксиоматика У. Нолла и А.А. Ильюшина обычно излагается с использованием операторной (или функциональной) формы определяющего соотношения (ОС) вида

$$\Sigma[\mathbf{r}(\mathbf{R}_0, t), t] = \mathbf{F}(\mathbf{r}^t, \theta^t, \chi_\alpha^t; \mathbf{R}_0, t). \quad (1.1)$$

Здесь Σ – некоторая мера напряженного состояния, \mathbf{r} , \mathbf{R}_0 – радиус-вектор частицы в актуальной и отсчетной конфигурациях соответственно, t – время, верхний индекс t означает предысторию изменения соответствующего параметра до момента времени t , \mathbf{F} – определяющее отображение (оператор), θ – температура, χ_α – параметры, описывающие воздействия нетермомеханического типа (например, радиацию).

Конечно, запись этих соотношений в общем виде (1.1) не позволяет рассматривать конкретные физико-механические процессы; однако его удобно применять при проверке допустимости конститутивной модели, выполнении постулатов общей теории определяющих соотношений, таких как принцип детерминизма, принцип независимости от выбора системы отсчета и др. Конкретизация (1.1), как правило, дает соотношения одной из двух групп: 1) соотношения функционального типа (\mathbf{F} – функционал над историей воздействий); 2) тензорно–алгебраические соотношения или дифференциальные соотношения. К первой группе, например, можно отнести соотношения вязкоупругости, теории упругопластических процессов А.А.Ильюшина, эндохронной теории пластичности; наиболее употребимые соотношения второй группы – уравнения линейно- и

нелинейно-вязких жидкостей, классической теории пластического течения, деформационной теории пластичности. Соотношения первой группы сложны с точки зрения их идентификации (требуют весьма сложных экспериментов), имеют весьма сложную математическую структуру, что затрудняет их применение для решения реальных задач. От этих недостатков свободны соотношения второй группы, однако обычно они не позволяют учитывать историю воздействий (либо учитывают ее незначительную часть, например, сопротивление деформации в классической теории пластического течения полагается зависящим от длины дуги пластической деформации, имеет место «память скалярного типа»), что недопустимо для широкого класса материалов с памятью.

Естественным образом возникает вопрос: а нельзя ли соединить достоинства соотношений указанных двух групп, т.е. сформулировать конститутивную модель таким образом, чтобы, с одной стороны, она связывала переменные в текущий момент времени (по структуре принадлежала бы второй группе), а с другой – содержала бы в себе свойство памяти? Если это возможно, то что требуется добавить в соотношения второй группы для учета свойства памяти?

Заметим, что в ряде существующих теорий в неявной форме предполагается существование конечного числа параметров, полностью характеризующих состояние исследуемой частицы и ее реакцию на внешние воздействия в любой фиксированный момент времени (например, в теории пластического течения это параметры, определяющие форму и положение поверхности текучести). Вообще говоря, последнее не является очевидным фактом и должно быть принято в качестве исходного постулата в любой рациональной теории, претендующей на использование для построения конкретных ОС.

На основе анализа известных подходов и физического описания процессов, изучаемых в современной механике сплошных сред, можно выдвинуть следующую гипотезу:

реакция материала в представительном объеме рассматриваемого масштабного уровня в каждый момент времени полностью определяется значениями тензорзначных термомеханических характеристик материала, конечного набора внутренних переменных, параметров физико-механических воздействий и их производных по времени требуемого порядка в исследуемый момент времени.

В случае принятия такой гипотезы отклик материала будет определяться тензорзначными функциями (или простейшими дифференциальными операторами) тензорзначных параметров воздействия. В то же время история воздействий не отбрасывается, ее «носителями» являются дополнительно вводимые параметры — внутренние переменные, о которых подробно говорится ниже. Рассмотрим структуру моделей материала, построенных на данной гипотезе.

Будем через Σ обозначать меру (в общем случае произвольную) напряженного состояния, через Σ^T – ее независимую от выбора системы отсчета скорость изменения, через $\mathbf{P}_\gamma, \gamma = \overline{1, \Gamma}$ – параметры воздействия термомеханической (например, температура, мера деформированного состояния и т.д.) и нетермомеханической (например, радиация, химические воздействия) природы.

Как известно, физические уравнения любого типа являются моделями, целевыми отражениями поведения реальных материалов в определенных диапазонах изменения параметров воздействия. В силу этого КМ должны содержать в своей структуре параметры, ответственные за взаимодействие микрочастиц (молекул, атомов и т.д.) реального материала. Среди последних можно выделить относительно устойчивые, незначительно изменяющиеся в исследуемом диапазоне воздействий параметры, которые

обычно называют материальными константами (например, модуль упругости, коэффициент Пуассона и т.д.); в большинстве случаев эти параметры отражают взаимодействия частиц материала на микро- и атомарном уровне и малочувствительны к мезо- и микроструктуре.

В то же время процессы необратимого (неупругого) деформирования, как показывают многочисленные экспериментальные исследования, весьма чувствительны к изменению мезо- и микроструктуры материала, которые существенным образом трансформируются в процессе деформирования. Указанные процессы тесно взаимосвязаны: с одной стороны, макронагружения (макродеформации) являются источником, движущей силой изменения мезо- и микроструктуры; с другой стороны, эволюция мезо- и микроструктуры является фактором, определяющим поведение материала на макроуровне. В связи с этим учет в формулируемых КМ эволюции мезо- и микроструктуры представляется совершенно обязательным. По нашему мнению, имеются, по крайней мере, две возможности учета эволюции мезо- и микроструктуры: неявным или явным способом. В первом случае в структуру ОС вводятся достаточно сложные операторы над историей макронагружения (макродеформации), без использования соответствующих параметров, описывающих собственно эволюцию мезо- и микроструктуры (соотношения первой группы). Как правило, в этом случае трудно выявить и обосновать физический смысл, механизмы деформирования, описываемые различными операторами модели материала.

В последние десятилетия все большее признание находит второй подход – явное введение в структуру определяющих соотношений параметров, описывающих состояние и эволюцию мезо- и микроструктуры, с формулировкой эволюционных (кинетических) уравнений для этих параметров, называемых внутренними переменными. В литературе, посвященной различным теориям процессов необратимого деформирования, внутренними переменными называют параметры, отражающие структуру и механизмы деформирования на мезо- и микроуровнях.

Этимология термина «внутренние переменные», вероятно, связана и с (неравновесной) термодинамикой, где внутренними переменными называют параметры состояния термодинамической системы, управлять напрямую изменением которых за счет внешних воздействий невозможно. Иначе говоря, эти переменные описывают «внутреннюю жизнь» термодинамической системы, чрезвычайно богатую сценариями развития, неустойчивостями, возникновением и разрушением внутренних структур.

К основным преимуществам этого подхода относятся ясность физической интерпретации эволюционных и определяющих соотношений, возможность прямой или косвенной проверки результатов анализа эволюции мезо- и микроструктуры, относительная простота совокупности уравнений модели (определяющих и эволюционных), широкие возможности обработки результатов решения эволюционных уравнений при переходе к макропеременным (с использованием различных операторов осреднения). Кроме того, поскольку эволюционные уравнения описывают фундаментальные физические механизмы, реализуемые в широком классе реальных материалов, модели данного типа обладают значительной универсальностью. К основным недостаткам рассматриваемого подхода следует отнести: большое число внутренних переменных и соответствующих эволюционных уравнений, необходимых для адекватного описания процесса необратимого деформирования; трудности решения «проблемы замыкания»; отсутствие в подавляющем большинстве случаев аналитических решений системы эволюционных и определяющих соотношений, что приводит к необходимости использования численных методов.

Следует отметить, что, с учетом приведенного выше определения внутренних переменных, в настоящее время невозможно назвать какую-либо теорию необратимых деформаций, не использующую явно или неявно эти переменные. Например, в классической теории пластичности широко применяется понятие поверхности текучести, отделяющее в пространстве напряжений (или деформаций) области упругого и неупругого деформирования. В процессе деформирования поверхность текучести изменяет свою форму и размеры, перемещается как целое. Эта эволюция поверхности текучести отражает изменение свойств материала, обусловленное изменением мезо- и микроструктуры, в связи с чем параметры, описывающие эволюцию этой поверхности, с полным правом можно отнести к внутренним переменным. Аналогичная ситуация имеет место и в других теориях (вязкоупругости, вязкопластичности, ползучести и др.).

В связи с вышесказанным в структуре ОС, описывающих процессы необратимого деформирования, должны фигурировать внутренние переменные. В качестве последних будут использоваться тензорзначные переменные $\mathbf{J}_\beta, \beta = \overline{1, \mathbf{V}}$ (произвольной в общем случае валентности); вопрос о типе, физическом смысле и аргументах внутренних переменных решается в рамках конкретных теорий ОС.

Следует отметить, что часть внутренних переменных непосредственно входит в структуру ОС данного масштабного уровня, такие переменные в дальнейшем будем обозначать $\mathbf{J}_\beta^e, \beta = \overline{1, \mathbf{V}^e}$ и для ясности называть их внутренними «явными» (*explicit*) переменными. К числу таких переменных относятся, например, параметры, характеризующие форму, положение и размеры поверхности текучести в теориях пластического течения.

Вообще говоря, к переменным данного типа следует отнести также упругие и пластические составляющие тензора «полных» деформаций в упругопластических телах. Действительно, эти составляющие, безусловно, отражают структурные перестройки материала; в ряде физических моделей, появившихся в последние годы, для их определения используют микро- и мезоскопические характеристики материала и процесса нагружения (деформирования). Тем не менее в настоящем изложении будем следовать традициям МСС, относя эти переменные к параметрам воздействия (или отклика) и используя известные соглашения об определении упругих составляющих из закона, описывающего разгрузку, и аддитивный или мультипликативный способ разложения деформаций на упругие и пластические составляющие.

Вторая группа внутренних переменных (в большинстве случаев относящихся к более глубоким масштабным уровням) входит в качестве переменных в эволюционные уравнения (ЭУ); переменные этой группы будем обозначать как $\mathbf{J}_\beta^i, \beta = \overline{1, \mathbf{V}^i}$; для того чтобы отличать их от переменных первой группы, будем называть их внутренними «скрытыми (неявными)» (*implicit*) переменными. К числу таких переменных в теориях неупругого деформирования поликристаллов (мезо- и макроуровней) можно отнести, например, плотность краевых и винтовых дислокаций. Полная совокупность внутренних переменных, таким образом, определяется как

$$\{\mathbf{J}_\beta\} = \{\mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{J}_\delta^i\}, \quad \beta = \overline{1, \mathbf{V}}, \quad \gamma = \overline{1, \mathbf{V}^e}, \quad \delta = \overline{1, \mathbf{V}^i}, \quad \mathbf{V} = \mathbf{V}^e + \mathbf{V}^i.$$

Введенные выше параметры \mathbf{P}_α в зависимости от контекста могут содержать все или часть мер, характеризующих напряженное и деформированное состояние исследуемого материала.

дуемого тела. Учитывая, что ОС в общем случае представляют собой ограничения (связи), накладываемые на параметры всех типов, ОС в достаточно общей форме может быть записано следующим образом:

$$\mathbf{P}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\gamma^e) = \mathbf{0}.$$

Наиболее употребительными в МСС являются уравнения состояния, записанные в разрешенном относительно напряжений виде

$$\Sigma = \mathbf{F}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\gamma^e), \quad (1.2)$$

или в «скоростной» форме

$$\Sigma^r = \mathbf{F}_r(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\gamma^e). \quad (1.3)$$

Определяющие соотношения (1.2) или (1.3) должны быть дополнены еще двумя группами соотношений – эволюционными и замыкающими. О второй группе будет сказано ниже. К эволюционным уравнениям, в отличие от традиционно принятых, здесь относятся соотношения только для внутренних скрытых переменных $\mathbf{J}_\delta^i, \delta = \overline{1, B^i}$. В общем виде изменение \mathbf{J}_δ^i можно описать следующими эволюционными (кинетическими) уравнениями, которые можно записать разрешенными в терминах или самих внутренних переменных, или их объективных производных:

$$\mathbf{J}_\delta^i = \mathbf{R}_\delta(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta^i), \quad (1.4)$$

$$\mathbf{J}_\delta^{ir} = \mathbf{R}_{r\delta}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta^i). \quad (1.5)$$

Заметим, что одной из наиболее сложных проблем теории определяющих соотношений (ТОС) является проблема замыкания эволюционных и определяющих уравнений (наиболее известным примером может служить проблема замыкания в теории турбулентности). Суть проблемы состоит в том, что при формулировке физических уравнений, особенно в случае необходимости описания эволюции микроструктуры, для представительного макрообъема возникает необходимость введения параметров меньшего масштабного уровня и эволюционных уравнений для них, и так далее – вниз по «лестнице масштабов». В некоторых теориях, например, теории пластического течения, удается замкнуть систему физических уравнений на рассматриваемом масштабном уровне (для теории пластического течения – введением функции текучести или пластического потенциала, зависящих от изменяемой микроструктуры). «Платой» за подобное замыкание является проведение весьма трудоемких и дорогостоящих экспериментов. В связи с этим в последние 10–15 лет интенсивно развиваются подходы к построению физических уравнений, основанные на иерархических моделях нескольких масштабных уровней.

В настоящее время в механике сплошной среды, микро- и мезомеханике наиболее употребительным является использование четырех масштабных уровней: макроскопического, мезоскопического, микроскопического и атомного. Конкретная шкала масштабных уровней устанавливается для различных классов материалов в соответствии с реализующимися механизмами деформирования (течения) и выполнением требования «представительности» объема соответствующего масштабного уровня. В МДТТ и, в частности, в теории пластичности в последние 10–20 лет широко используется другое важное понятие – структурных уровней (деформации), основанное на выделении

структурных дефектов материала, имеющих различную природу и происхождение, связанное с эволюцией дефектных структур по различным механизмам деформирования и характерных параметров (внутренних переменных), описывающих эволюцию и взаимодействие дефектов различных структурных уровней. Следует отметить, что процессы необратимого деформирования реализуются за счет одновременной или последовательной активизации механизмов различных структурных уровней. Масштаб структурных уровней определяется характерными размерами структурных неоднородностей. При формулировке ОС и ЭУ на различных масштабных уровнях каждому из них на основе тщательного физического анализа ставятся в соответствие определенные структурные уровни деформации и механизмы (моды) деформации; при этом один и тот же структурный уровень деформации может быть одновременно присущ нескольким масштабным уровням.

Возвращаясь к проблеме замыкания, следует отметить два наиболее употребительных подхода к ее решению. В первом – феноменологическом, параметры, характеризующие структуру на более низких масштабных уровнях, определяются функциональными уравнениями через параметры рассматриваемого уровня (например, как в модели турбулентности Рейнольдса) с последующей экспериментальной проверкой этих уравнений. Второй подход основан на построении иерархической совокупности моделей нескольких масштабных уровней и установлении связей между однотипными характеристиками процесса деформирования соседних уровней. Следует отметить, что в этом случае полностью избежать феноменологических соотношений, конечно, не удастся, однако они записываются для самого низкого масштабного уровня в принятой иерархической совокупности. Строго говоря, необходимы математические исследования «затухания» ошибок, внесенных при применении подобных феноменологических соотношений, при переходе на более высокие масштабные уровни.

В любом случае для замкнутой модели материала требуются уравнения, связывающие внутренние «явные» переменные, непосредственно входящие в ОС рассматриваемого масштабного уровня, с параметрами воздействия и внутренними скрытыми переменными. Общий вид таких замыкающих уравнений (ЗУ) мало отличается от (ЭУ) (1.4)–(1.5), однако они существенно различаются своим физическим «наполнением», подходами к их установлению и ролью в совокупности уравнений, модели материала, в связи с чем эти ЗУ выделяются в отдельную группу. Аналогично соотношениям (2)–(5) ЗУ они могут быть записаны в одном из двух видов:

$$\mathbf{J}_\gamma^e = \mathbf{C}_\gamma(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\delta^i), \quad (1.6)$$

$$\mathbf{J}_\gamma^{er} = \mathbf{C}_{r\gamma}(\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\delta^i). \quad (1.7)$$

Таким образом, в качестве полной системы уравнений (конститутивной модели), описывающих поведение материала, будет рассматриваться совокупность (называемая конститутивной моделью) ОС (1.2) (или (1.3)), ЭУ (1.4)(или (1.5)) и ЗУ (1.6)(или (1.7)). При этом в некоторых теориях неупругого деформирования могут отсутствовать ЭУ (в принятом здесь смысле), ЭУ и ЗУ могут входить неявным образом в ОС. Правые части всех групп соотношений в качестве аргументов могут содержать части параметров $\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\gamma^e, \mathbf{J}_\delta^i$, а в некоторых случаях в них может полностью отсутствовать тот или иной тип параметров (чаще всего \mathbf{J}_δ^i).

Следует отметить, что в большинстве случаев при использовании внутренних переменных соотношения конститутивной модели удается записать в виде тензорно-алгебраических уравнений, т.е. в виде тензорзначных функций тензорзначных аргументов, или простейших дифференциальных соотношений.

Вопрос выбора типа ОС, ЭУ и ЗУ – в терминах мер напряженного состояния и других параметров («интегральные» соотношения) или мер скоростей их изменения («дифференциальные» соотношения, соотношения скоростного типа) – в каждом конкретном случае решается исследователем. При этом учитываются соображения физического характера, сложности записи соотношений, ясности интерпретации результатов и т.д.; понятно, что в силу отсутствия четко определенных критериев подобный выбор во многом субъективен. Следует отметить, что общая система соотношений модели материала может содержать уравнения разных типов как по группам соотношений, так и внутри каждой из трех групп.

Опыт работы авторов в области построения моделей материалов свидетельствует о предпочтительности использования соотношений скоростного (дифференциального) типа. Вероятно, это связано с большей наглядностью и физической «прозрачностью» установления формы уравнений для скоростей изменения тех или иных параметров «здесь и сейчас» по сравнению с «интегральными» соотношениями, требующими «запоминания» предыстории воздействий. Следует сказать, что большинство известных авторам моделей материалов (особенно в теории пластичности) принадлежат именно скоростному типу. В то же время авторы не исключают соотношения «интегрального» типа из рассмотрения.

Введенная гипотеза согласуется с принципом детерминизма [11, 12]; отсутствуют противопоказания для ее совместного использования с аксиомой независимости от выбора системы отсчета и принципом локальности [11, 12]. В частности, при использовании принципа локальности в качестве аргументов в правых частях соотношений КМ можно использовать значения параметров $\mathbf{P}_\alpha, \mathbf{J}_\beta$ (и, возможно, градиентов части из них) и их производных в точке \mathbf{R}_0 в момент t . Использование принципа материальной индифферентности позволяет конкретизировать вид соотношений (1.2)–(1.7); в частности, может привести к необходимости замены материальных производных по времени теми или иными объективными производными.

Предлагаемый общий вид ОС (1.2)–(1.7) представляется более удобным для последующего анализа и приложений, чем запись ОС в операторной форме (1.1). В частности, для соотношений (1.2)–(1.7) в полной мере могут быть использованы хорошо разработанные в тензорном анализе теория тензорных функций тензорных аргументов, теория инвариантов и другие разделы. Предлагаемая структура конститутивной модели применена для построения модели образования текстур в поликристаллах.

Модель процесса текстурообразования для поликристаллов с ГЦК решеткой

Наличие упорядоченной структуры в монокристаллах приводит к анизотропии их физико-механических свойств. Анизотропия монокристаллов, а также поликристаллов, полученных в результате направленной кристаллизации или армирования, называется *начальной* или *первичной*. *Вторичная* или *деформационная* анизотропия свойств поликристаллов получается в результате пластического деформирования при обработке давлением (волочение, прокатка и т.п.). Начиная с деформаций примерно в 30%, под микроскопом на предварительно полированных образцах можно наблюдать следы

скольжения в виде прямых линий, которые одинаково ориентированы в пределах отдельных зерен. При деформации больше 50% уже заметно изменение формы зерен. При этом изначально округлое зерно (рис. 1,а) в процессе деформирования вытягивается, образуя волокнистую или слоистую структуру (рис. 1,б).

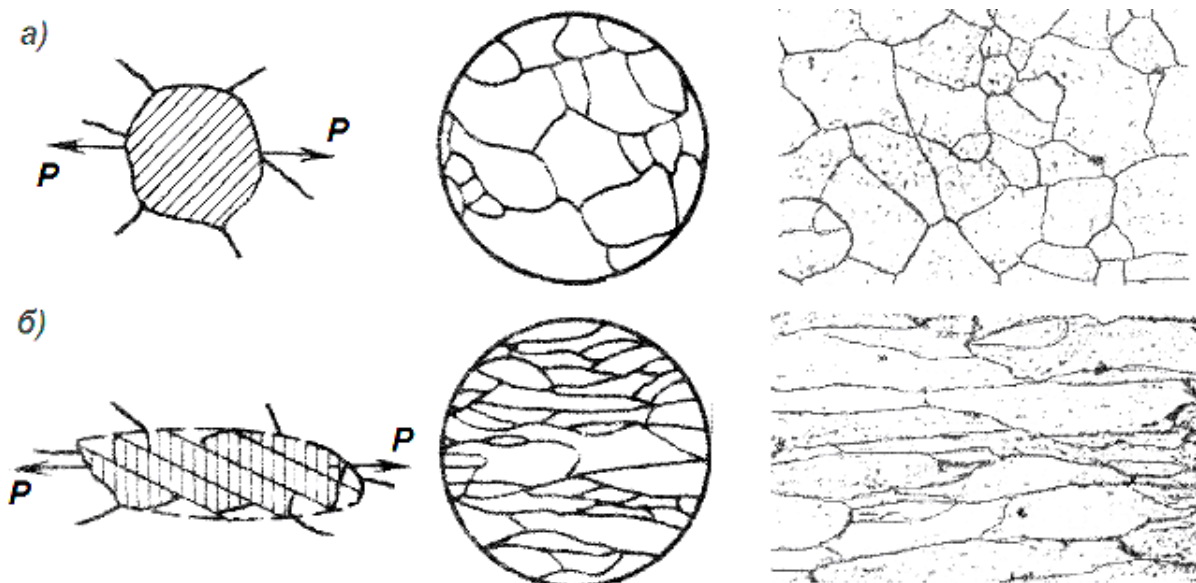


Рис. 1. Изменение формы зерна железа в результате скольжения (штриховой линией показана граница деформированного зерна, кажущаяся ровной благодаря ничтожно малым размерам пачек скольжения):

- а – схема и микроструктура ($\times 150$) металла до деформации;
- б – схема и микроструктура ($\times 150$) металла после деформации [6]

Одновременно с изменением формы зерна внутри него происходит поворот кристаллографической системы координат (КСК) материала. При этом КСК соседних зерен поворачиваются согласованно, стремясь привести свою ориентацию в соответствие с направлением главных напряжений от внешней нагрузки. В результате возникает *текстура*, которая приближает свойства поликристалла (и их анизотропию) к монокристаллу. Чем более развиты деформации, тем большая часть кристаллических зерен получает преимущественную ориентацию. Практически любая пластическая деформация, за исключением деформации по схеме всестороннего сжатия, сопровождается образованием кристаллографической текстуры того или иного типа и той или иной интенсивности (рис.2).

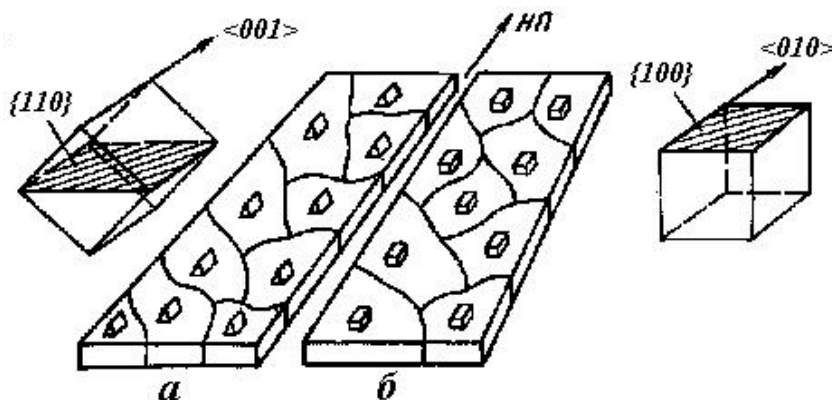


Рис.2. Схема ориентировки КСК материала зерен в листовом материале в случае кубической (а) и ребровой (б) текстуры

Образование текстуры приводит к возникновению анизотропии свойств. Так, например, имеется зависимость между модулем упругости E и направлением в прокатанных металлических листах. Для многих ГЦК и ОЦК металлов имеется явно выраженный экстремум E для угла $\varphi \approx 45^\circ$ (φ – угол к НП – направлению прокатки, НП – направление, перпендикулярное плоскости прокатки). Однако характер экстремума различен. На рис.3 приведены зависимости величины E от угла φ для прокатанных листов из различных материалов. Анизотропными при обработке давлением становятся не только упругие свойства поликристалла, но и прочностные (пресс-эффект), физические (намагниченность) и другие [5].

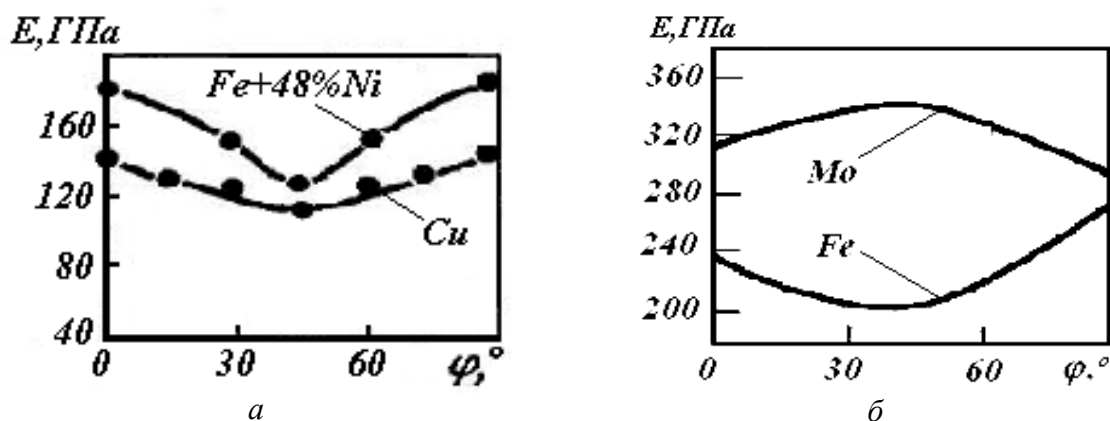


Рис. 3. Зависимость модуля упругости E от угла φ к НП листов для различных материалов [2]

Распределение ориентаций КСК зерен в поликристалле носит случайный характер. Для его описания используют как полюсные фигуры, так и функции распределения ориентировок (ФРО) $f(\Omega)$. Последняя определяет плотность распределения углов Эйлера, задающих ориентацию КСК зерен относительно некоторой выбранной лабораторной системы координат (ЛСК), обычно связанной с характерными направлениями обработки. Область изменения углов Эйлера определяет ориентационное пространство Ω . ЛСК обычно привязывают к характерным направлениям процесса обработки давлением. Например, ось x_1 выбирают вдоль НП листа, x_2 – перпендикулярно НП в плоскости листа, x_3 – по нормали к плоскости листа.

Большинство современных моделей образования текстур в поликристаллах рассматривают повороты кристаллических решеток зерен поликристалла на микроуровне, основываясь на анализе эволюции дислокационных субструктур внутри зерен и дислокаций ориентационного несоответствия на их границах [10]. Обширный класс моделей текстурообразования основан на физических теориях типа Тейлора – Бишопа – Хилла [13, 14], применяемых для представительного объема поликристалла, в которых явным образом не вводится источник ротаций (моментные напряжения), повороты решетки связываются с антисимметричной частью тензора пластических сдвигов. В настоящей работе описание процессов текстурообразования на мезоуровне будет осуществляться без рассмотрения движения дислокаций сквозь границы зерен в явной форме; появление и изменение моментных напряжений, приводящих к разворотам зерен, обуславливается несоответствием ориентаций и сдвигов по системам скольжения (описывающих движение дислокаций внутри зерен) в соседних зернах.

В настоящее время модели упруго-пластического деформирования представительного объема поликристалла строят с использованием прямых [1] или статистических [7, 8, 13, 14] подходов. Прямые модели, основанные, как правило, на использовании мето-

да конечных элементов (МКЭ), позволяют наиболее точно находить распределение напряжений и деформаций в области, учитывать ближнее и дальнее взаимодействие зерен. Однако применение данного подхода ввиду чрезвычайно больших вычислительных затрат чаще всего ограничено двухмерным случаем. Статистические модели в вычислительном плане более эффективны и активно применяются для моделирования реальных материалов. Серьезным недостатком данных моделей является невозможность корректного учета взаимодействия отдельного зерна поликристалла с его окружением. Попытки более корректного учета взаимодействия зерен [13, 14], связанные с переходом от отдельного зерна как элемента статистической выборки к совокупности двух (модель LAMEL) или большего числа зерен (модель ALAMEL и другие), незначительно улучшают точность результатов. В данной работе в качестве модели представительного объема поликристалла использована физическая теория, предложенная Т.Д. Линем [7], где элементом статистической выборки, как и в моделях Тейлора–Бишопа–Хилла, является зерно, но в отличие от последних учитываются упругие деформации.

Предлагаемую в данной работе модель текстурообразования можно отнести к двухуровневым структурным моделям. На макроуровне параметрами процесса являются макронапряжения $\Sigma(t)$ и макродеформации $\mathbf{E}(t)$, связанные с соответствующими напряжениями $\boldsymbol{\sigma}(t, \mathbf{r})$ и деформациями $\boldsymbol{\varepsilon}(t, \mathbf{r})$ мезоуровня через статистическое осреднение. К макропеременным можно отнести параметры, описывающие функцию распределения ориентаций (ФРО) кристаллографической системы координат (КСК) материала зерна, изменяющуюся при деформировании. На мезоуровне пластическое деформирование зерна осуществляется сдвигом по кристаллографическим системам скольжения (СС). При этом сдвиг может вызывать разворот КСК материала зерна. Пластический сдвиг и напряжение течения для СС, углы, задающие ориентацию КСК материала зерна, можно отнести к явным внутренним переменным модели. Закон упрочнения для СС, связывающий напряжение течения с пластическими сдвигами, а также закон изменения ориентаций КСК являются уравнениями состояния типа (1.2) или (1.3).

Основными гипотезами, принятыми при разработке модели, применяемой в данной работе, являются следующие:

1. Рассматривается холодная пластическая деформация представительного объема однофазного поликристалла с ГЦК решеткой, все зерна которого имеют одинаковый размер и форму, число соседей у всех одинаково и неизменно.

2. Представительный объем будем считать состоящим из конечного числа M материальных точек. Под материальной точкой понимаем отдельное зерно поликристалла.

3. К входным параметрам модели относятся начальное распределение ориентаций КСК зерен (в простейшем случае – случайное равномерное распределение), размер зерна d , история нагружения, время t (или параметр нагружения). Выходные параметры – текущее распределение ориентаций КСК зерен и значения компонент тензоров деформаций и напряжений на уровне представительного объема.

4. Напряжения и деформации для представительного объема определяются осреднением по всем материальным точкам напряжений и деформаций; с учетом гипотезы 1 тогда можно использовать следующие соотношения:

$$\Sigma(t) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \boldsymbol{\sigma}^{(m)}(t), \quad \mathbf{E}(t) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}(t), \quad (2.1)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{(m)}(t) = \int_0^t \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{(m)}(t) dt, \quad \boldsymbol{\varepsilon}^{(m)}(t) = \int_0^t \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(m)}(t) dt. \quad (2.2)$$

5. Будем предполагать, что скорость полных деформаций для всех материальных точек в любой момент нагружения совпадает с заданной $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(t)$ для представительного объема (гипотеза Фойгта):

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(m)}(t) = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}(t) \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall m = 1, 2, \dots, M. \quad (2.3)$$

6. Материальные точки испытывают упругую и пластическую деформацию. При этом для скоростей этих деформаций справедлива гипотеза аддитивности

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{(m)}(t) = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e(m)}(t) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{p(m)}(t) \quad \forall t \in [0, T], \quad \forall m = 1, 2, \dots, M. \quad (2.4)$$

7. В любой момент нагружения справедлив закон Гука:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{(m)}(t) = \mathbf{C}_t^{(m)} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{e(m)}(t), \quad (2.5)$$

где $\mathbf{C}_t^{(m)}$ – тензор модулей упругости для материальной точки m в момент времени t . Здесь $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ и $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ – коротационные производные [12] напряжений и деформаций, учитывающие поворот кристаллической решетки зерна. Для конкретной точки компоненты данного тензора зависят от ориентации ее КСК относительно ЛСК, описываемой набором углов Эйлера $\mathcal{E}_{\text{КСК}}^{(m)}(t)$, изменяющихся в процессе деформирования. Так как ГЦК-кристалл относится к материалам кубической симметрии, то для него тензор модулей упругости \mathbf{C}_0 в КСК задается тремя константами: c_{11} , c_{12} , c_{44} или E , μ , G_{12} .

Пластическое деформирование осуществляется за счет сдвигов по кристаллографическим системам скольжения (СС) материала. ГЦК-кристалл имеет 12 СС, поведение которых описывается однотипными соотношениями с одним и тем же набором констант. Для описания эффекта Баушингера для СС необходимо вводить два напряжения течения: для положительного и отрицательного направления сдвига. Для удобства отрицательное направление данной СС можно считать отдельной СС, где касательные напряжения и сдвиговые деформации становятся положительными. В этом случае число СС кристалла удваивается. Ориентация СС α относительно КСК задается набором углов Эйлера $\mathcal{E}_{\text{СС}}^\alpha$, причем в процессе деформирования эта ориентация остается неизменной.

8. Скорости пластических деформаций в КСК для конкретного момента нагружения определяются суммой скоростей сдвига по активным СС,

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_1^{p(m)}(t) = \sum_{\alpha=1}^{N_a} \mathbf{M}^\alpha \dot{\gamma}_\alpha^{p(m)}(t), \quad (2.6)$$

где $\dot{\gamma}_\alpha^{p(m)}(t) \geq 0$ – скорость пластических сдвигов по СС α , $N_a \leq 5$ – число активных СС; \mathbf{M}^α – ориентационный тензор для СС α , построенный с использованием углов $\mathcal{E}_{\text{СС}}^\alpha$:

$$\mathbf{M}_{ij}^\alpha = \frac{1}{2} (b_i^\alpha n_j^\alpha + b_j^\alpha n_i^\alpha), \quad (2.7)$$

где \mathbf{b}^α и \mathbf{n}^α являются единичными векторами направлений скольжения и нормалей плоскостей СС α в текущей конфигурации. Накопленный сдвиг по СС α определяется как интеграл по времени от скоростей деформаций сдвига,

$$\gamma_\alpha^p(t) = \int_{\tau=0}^t \dot{\gamma}_\alpha^p(\tau) d\tau. \quad (2.8)$$

9. В процессе пластических сдвигов по СС происходит рост плотности дислокаций и, как следствие, рост напряжений, необходимых для дальнейшего деформирования, т.е. упрочнение по СС. Упрочнение по СС будем описывать степенным законом

$$\tau_{\alpha}^c(t) = \tau_0 + G_c (g^p(t))^n, \quad (2.9)$$

где τ_{α}^c – сопротивление сдвигу по СС α , τ_0 – начальное (сдвиговое) напряжение течения, G_c – модуль упрочнения, n – коэффициент чувствительности,

$$g^p(t) = \int_{\tau=0}^t \sum_{\beta=1}^{N_a(\tau)} \dot{\gamma}_{\beta}^p(\tau) d\tau$$

– эффективный суммарный сдвиг по всем СС, вычисляемый в предположении об изотропности упрочнения по СС.

10. В любой момент нагружения для всех точек и для всех СС должен выполняться закон Шмида,

$$\tau_{\alpha}^{(m)}(t) - \tau_{\alpha}^{c(m)}(t) \leq 0, \quad (2.10)$$

где $\tau_{\alpha}^{(m)}(t) \geq 0$ – касательные напряжения от приложенных нагрузок, действующие в СС α точки m . СС будем называть активной, если для нее выполняются следующие соотношения:

$$\begin{cases} \tau_{\alpha}^{(m)} = \tau_{\alpha}^{c(m)}, \\ \dot{\tau}_{\alpha}^{(m)} = \dot{\tau}_{\alpha}^{c(m)}. \end{cases} \quad (2.11)$$

11. Система нелинейных уравнений (2.11) не позволяет однозначно определить скорости пластических деформаций сдвига. Из возможного множества решений выбираются те, которые удовлетворяют условию минимума мощности работ,

$$\sum_{\alpha=1}^{N_a} \tau_{\alpha}^{(m)} \dot{\gamma}_{\alpha}^{p(m)} \rightarrow \min. \quad (2.12)$$

12. Под поворотами материальных точек будем понимать повороты КСК материала зерен как целого, без образования фрагментированной структуры. Предполагается, что основной вклад в возникновение моментов, приводящих к развороту отдельных зерен и, таким образом, приводящих к текстурообразованию, вносят границы зерен. Возникновение моментов на границах будет связываться в первую очередь с несоответствием сдвигов по кристаллографическим системам соседних зерен, что, в свою очередь, обусловлено наличием разориентации СС соседних зерен, образующих данную границу. Примем линейную зависимость вектора скорости изменения вращательного момента от скоростей сдвига по СС α

$$\dot{\mu}_{\alpha}^{(m)} = a K_{\alpha}^{(m)} \dot{\gamma}_{\alpha}^{(m)}, \quad (2.13)$$

где a – константа материала, $K_{\alpha}^{(m)} \in [0,1]$ – коэффициент разориентации, зависящий от ориентации СС α зерна m по отношению к СС соседних зерен. Ориентацию СС α можно задать с помощью двух векторов: нормали к плоскости скольжения $N_{\alpha}^{(m)}$ и направления скольжения $R_{\alpha}^{(m)}$ в этой плоскости. Если у непосредственных соседей данного зерна найдется СС β , для которой $N_{\beta}^{(n)} \parallel N_{\alpha}^{(m)}$ и $R_{\beta}^{(n)} \parallel R_{\alpha}^{(m)}$, то $K_{\alpha}^{(m)} = 0$ и вращающий мо-

мент $\mu_\alpha^{(m)}$ в этом случае возникать не будет. Введем углы разориентации для СС α зерна m с соседним зерном n следующим образом:

$$\Delta\Psi_\alpha^{mn} = \min_{\beta=1,24} \left[\arccos \frac{N_\beta^{(n)} \cdot N_\alpha^{(m)}}{|N_\beta^{(n)}| |N_\alpha^{(m)}|} \right], \quad \Delta\Phi_\alpha^{mn} = \min_{\beta=1,24} \left[\arccos \frac{R_\beta^{(n)} \cdot R_\alpha^{(m)}}{|R_\beta^{(n)}| |R_\alpha^{(m)}|} \right]. \quad (2.14)$$

Учитывая, что непосредственными соседями зерна m являются M_m зерен, то углы разориентации можно определять как средневзвешенные величины

$$\Delta\Psi_\alpha^{(m)} = \frac{\sum_{n=1}^{M_m} S_{mn} \Delta\Psi_\alpha^{mn}}{\sum_{n=1}^{M_m} S_{mn}}, \quad \Delta\Phi_\alpha^{(m)} = \frac{\sum_{n=1}^{M_m} S_{mn} \Delta\Phi_\alpha^{mn}}{\sum_{n=1}^{M_m} S_{mn}}, \quad (2.15)$$

где S_{mn} – площадь границы между зернами m и n .

Максимальные значения углов разориентации $\Delta\Psi_\alpha^{(m)}$ и $\Delta\Phi_\alpha^{(m)}$ зависят от типа кристаллической решетки и закона распределения ориентаций КСК зерен до деформирования. Очевидно, максимальная разориентация для фиксированного типа решетки достигается при случайном равномерном законе распределения ориентаций КСК зерен. Для кубических решеток угол в 75° можно принять максимально возможным значением для $\Delta\Psi_\alpha^{(m)}$ и $\Delta\Phi_\alpha^{(m)}$. Тогда коэффициент разориентации можно записать следующим образом:

$$K_\alpha^{(m)} = \frac{6}{5\pi} (\Delta\Psi_\alpha^{(m)} + \Delta\Phi_\alpha^{(m)}). \quad (2.16)$$

Суммируя вектора скорости изменения моментов по всем активным СС, получаем скорость изменения момента для материальной точки (зерна):

$$\dot{\mathbf{\mu}}^{(m)} = \sum_{\alpha} \dot{\mathbf{\mu}}_{\alpha}^{(m)}. \quad (2.17)$$

Несовместность деформирования зерна со своими соседями приводит к росту моментов по границам зерна, однако до некоторого критического значения момента μ_0 развороты решетки зерна носят упругий характер. По аналогии с теорией течения можно ввести функцию моментного упрочнения, записав ее в степенном виде

$$f_{\mu}(\Delta\mathcal{E}) = \mu_0 + G_{\mu} \Delta\mathcal{E}^p, \quad (2.18)$$

где μ_0 – начальный критический момент, G_{μ} – модуль моментного упрочнения, p – коэффициент чувствительности, $\Delta\mathcal{E}(t) = \int_0^t \dot{\mathcal{E}}_{\text{КСК}}(\tau) d\tau$ – поворот КСК материала точки.

Тогда в любой момент нагружения для всех точек должно выполняться следующее ограничение:

$$M^{(m)} - f_{\mu}(\Delta\mathcal{E}^{(m)}) \leq 0, \quad (2.19)$$

где $M^{\{m\}} = |\mathbf{\mu}^{\{m\}}(t)|$ – величина (модуль) момента, приложенного к точке.

Вращение КСК для точки активируется, если для нее выполняются условия, аналогичные (2.11),

$$\begin{cases} M^{(m)} = f_{\mu}^{(m)}, \\ \dot{M}^{(m)} = \dot{f}_{\mu}^{(m)}. \end{cases} \quad (2.20)$$

Вращение КСК для точки в момент времени t происходит относительно некоторой мгновенной оси вращения со скоростью $\dot{\Theta}_{\text{КСК}}^{(m)}$. Направление скорости вращения должно совпадать с направлением скорости изменения вращающего момента. Разрешая систему нелинейных уравнений (2.20) относительно $\dot{\Theta}_{\text{КСК}}^{(m)}$ и интегрируя по времени, получаем ориентацию КСК точки в любой момент времени.

Результаты

Рассмотрим вначале применение описанной выше модели для двухмерного случая. В качестве модельного материала зерен используем плоский гексагональный кристалл (ПГК) [1]. Плоскость моделирования в этом случае совпадает с плоскостью наиболее плотной упаковки ГЦК-кристалла. ПГК имеет три СС (см. рис. 4), причем одна из СС направлена по оси x_1 . Ориентация КСК задается углом φ между осью x_1 КСК и осью x_1' ЛСК.

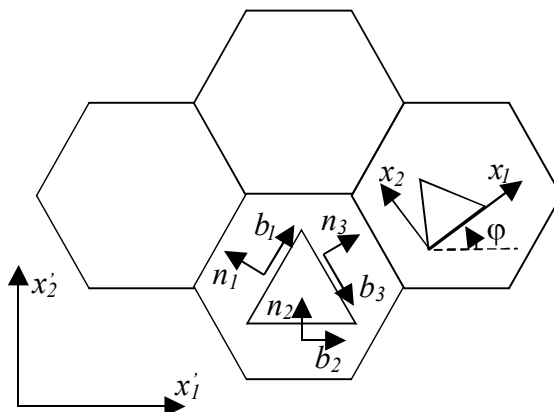


Рис.4. СС в двухмерном случае для ПГК кристалла и расположение осей КСК x_i и ЛСК x_i'

Физико-механические константы соответствуют свойствам меди. Закон упрочнения (2.9) для СС примем в линейной форме:

$$\tau_{\alpha}^c(t) = 0,01 + 0,005 g^p(t).$$

Свойства, связанные с вращением КСК: $a = 0,005$ МН·м; $f_{\mu}(\Delta\Theta) = 0,007$ МН·м, т.е. здесь для простоты принимаем отсутствие упрочнения по ротационной моде. Рассматривалась выборка из 1000 зерен гексагональной формы. Число непосредственных соседей у данного зерна принималось равным 6. Начальное распределение ориентаций КСК принималось соответствующим случайному равномерному закону, причем в силу симметрии интервал изменения углов – от 0° до 120° . Эволюция изменения ориентаций КСК исследовалась при одноосном сжатии до 85% вдоль оси x_1' .

На рис. 5 приведено изменение математического ожидания $\bar{\varphi}$ и среднеквадратического отклонения $\sigma(\varphi)$ ориентации КСК зерен в зависимости от степени сжатия. Стремление в процессе деформирования величины математического ожидания $\bar{\varphi}$ к нулю (т.е. поворот оси x_1 КСК зерен к направлению сжатия) и уменьшение степени разброса ориентаций свидетельствуют об образовании в данном случае текстуры. При этом СС зерен стараются занять симметричное по отношению к главным осям нагружения положение. При достижении подобной ориентации СС, параллельная оси сжатия, не может быть активной, а две другие СС становятся равнонагруженными, обеспечивая в дальнейшем множественное скольжение.

Рассмотрен трехмерный случай одноосного сжатия меди. Все результаты получались на выборке из 1891 одинаковых по форме и размерам зерен. Среднее число непосредственных соседей зерна принималось равным 12. Использование трехмерной модели позволяет сравнить полученные результаты с известными экспериментальными фактами.

Закон упрочнения для СС принимался в виде $\tau_\alpha^c(t) = 15 + 500(g^p(t))^{0,65}$. Функция моментного упрочнения соответствовала двумерному случаю $f_\mu(\Delta\varepsilon) = 0,007$ МН·м, т.е. упрочнением по ротационной моде пренебрегаем. На рис. 6 приведены полученные с использованием рассмотренной выше модели зависимости осредненных по представительному объему интенсивности напряжений σ_i^* от средних интенсивностей деформаций ε_i^* при двух значениях параметра a . Для сравнения на этом же рисунке показана экспериментальная зависимость, полученная при осадке меди [9].

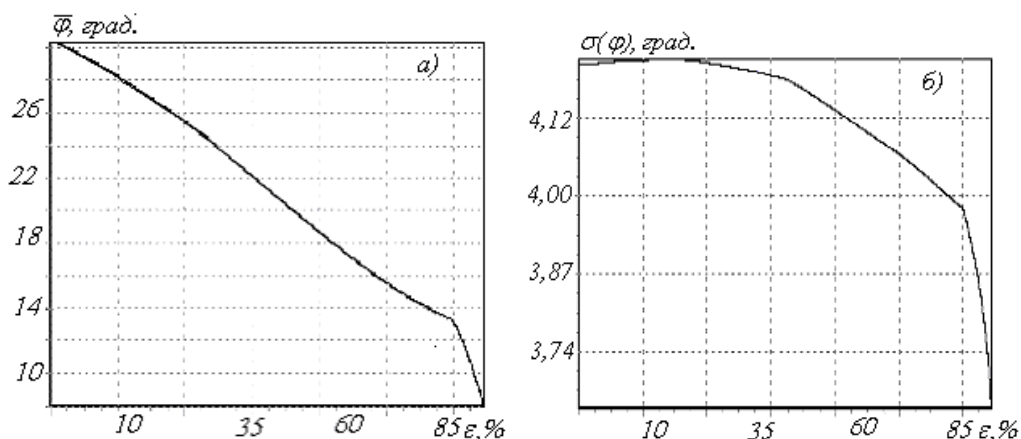


Рис.5. Изменение математического ожидания $\bar{\varphi}$ (а) и среднеквадратического отклонения $\sigma(\varphi)$ (б) в зависимости от степени сжатия

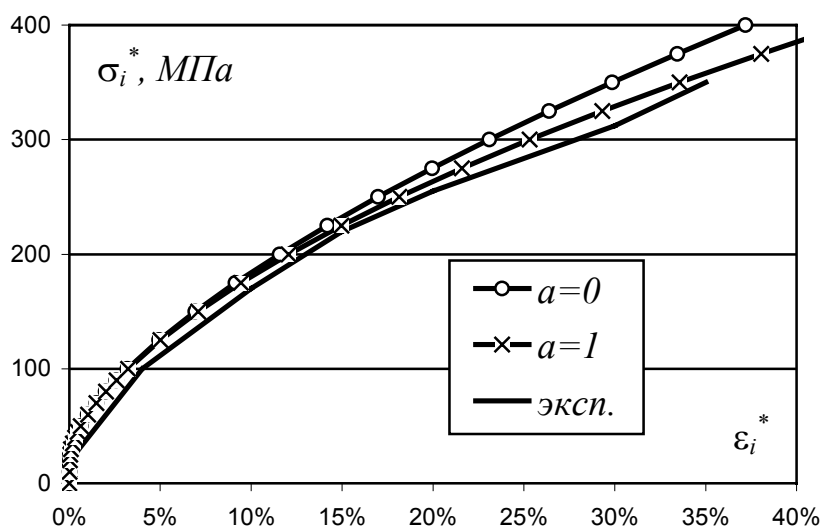


Рис. 6. Зависимость $\sigma_i^* - \varepsilon_i^*$ при осадке представительного объема

При значении коэффициента $a=0$ вращения КСК зерна нет вследствие того, что величина момента в соотношении (2.14) будет равна нулю. При этом поликристалл ведет себя более жестко (при одинаковых значениях интенсивности деформаций имеем большие значения интенсивности напряжений).

На рис. 7 приведены результаты расчета эволюции полюсных фигур при сжатии для направления $[100]$. Направление сжатия перпендикулярно плоскости рисунка.

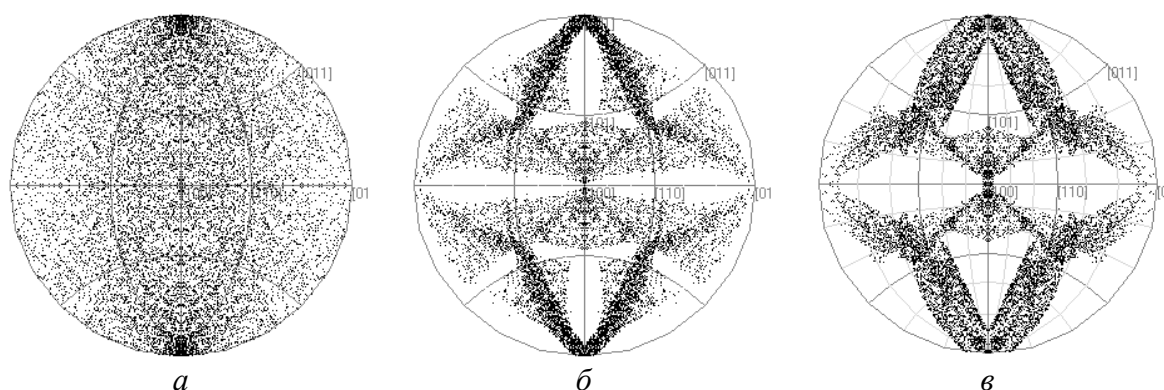


Рис. 7. Полюсные фигуры при сжатии для направления $[100]$ (а – 0%, б – 20%, в – 40%, направление сжатия перпендикулярно плоскости рисунка)

Приведенные на рис. 7 изображения полюсных фигур позволяют заключить, что в результате осадки направления $[100]$ разворачиваются в плоскости, наклоненные под углом в 45° к направлению осадки. При этом плоскости (110) стараются развернуться параллельно направлению осадки, формируя типичную для подобных процессов аксиальную текстуру [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ № 04-01-00549.

Библиографический список

1. Ашихмин, В.Н. Прямое моделирование упругопластического поведения поликристаллов на мезоуровне / В.Н. Ашихмин, П.В. Трусов // Физическая мезомеханика. – 2002. – Т.5. – №3. – С.37–51.
2. Вассерман, Г. Текстуры металлических материалов / Г. Вассерман. – М.: Металлургия, 1969. – 654 с.
3. Ильюшин, А.А. Механика сплошной среды / А.А. Ильюшин. – М.: Изд-во Москов. ун-та, 1980. – 310 с.
4. Ильюшин, А.А. Пластичность. Основы общей математической теории / А.А. Ильюшин. – М.: Изд-во АН СССР, 1963. – 280 с.
5. Кудрявцев, И.П. Текстуры в металлах и сплавах / И.П. Кудрявцев. – М.: Металлургия, 1965. – 292 с.
6. Лахтин, Ю.М. Материаловедение / Ю.М. Лахтин, В.П. Леонтьева. – М.: Машиностроение, 1990. – 528 с.
7. Линь, Т.Г. Физическая теория пластичности / Т.Г. Линь // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. – Вып.7. – М.: Мир, 1976. – С.7–68.
8. Лихачев, В.А. Структурно-аналитическая теория прочности / В.А. Лихачев, В.Г. Малинин. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.
9. Полухин, П.И. Сопротивление пластической деформации металлов и сплавов / П.И. Полухин, Г.Я. Гун, А.М.Галкин. – М.: Металлургия, 1983 – 352 с.
10. Рыбин, В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов / В.В. Рыбин. – М.: Металлургия, 1986 – 224 с.
11. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред / К. Трусделл. – М.: Мир, 1975. – 592 с.
12. Трусов, П.В. Теория определяющих соотношений: курс лекций: Ч.1. Общая теория / П.В. Трусов, И.Э. Келлер. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн.ун-та, 2006. – 173 с.
13. Van Houtte, P. Quantitative prediction of cold rolling textures in low-carbon steel by means of the LAMEL model / P. Van Houtte, L. Delannay, I. Samajdar // Textures and Microstructures. – 1999. – Vol.31. – P. 109–149.
14. Van Houtte, P. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model / P. Van Houtte, S. Li, M. Seefeldt, L. Delannay // Int. J. Plasticity. – 2005. – Vol.21. – P. 589–624.

Получено 7.09.2006.