

УДК 539.3

И.Л. Исупова, П.В. Трусов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

**ОБЗОР МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ
ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В СТАЛЯХ**

В сталях наблюдаются все известные для твердого состояния фазовые превращения: полиморфное с широким спектром морфологических и кинетических особенностей; эвтектидный распад (перлитное превращение); распад пересыщенных твердых растворов внедрения и замещения; упорядочение с изменением ближнего и дальнего порядка в аустените и мартенсите. Важная особенность данных систем заключается в резко различающейся диффузионной подвижности металлических атомов и углерода, поэтому при превращениях перестройка кристаллической решетки может происходить наряду с диффузионным перераспределением углерода и легирующих элементов.

В представленной статье приводится обзор работ, посвященных математическому моделированию как бездиффузионных (мартенситных), так и диффузионных фазовых превращений, происходящих в сталях при термомеханической нагрузке. Можно выделить два основных подхода к построению моделей полиморфных превращений. Первый подход основан на явном введении в рассмотрение межфазных границ с учетом условий на границе фаз деформируемого материала и кинетики развития новой фазы. Второй подход связан с разработкой моделей, основанных на введении дополнительных параметров состояния, характеризующих те или иные особенности структуры материала «в среднем» (например, концентрация новой фазы), и формулировкой соотношений для них. Модели, применяемые для описания фазовых превращений, весьма разнообразны. В представленном обзоре приведены работы, в которых используются и многоуровневые, и самосогласованные, и прямые модели. Рассмотрены также работы, в которых модели основаны на градиентных теориях, что позволяет учесть влияние масштабных факторов на процессы фазовых превращений и поведение исследуемой стали.

Ключевые слова: обзор, модели, фазовые переходы, стали.

I.L. Isupova, P.V. Trusov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

**REVIEW OF MATHEMATICAL MODELS
ON PHASE TRANSFORMATIONS IN STEELS**

In steels all known solid state phase transformations are observed: polymorphic transformation with wide spectrum of morphological and kinetics features, eutectoid decomposition (pearlite transformation), decomposition of supersaturated solid solutions, short- and long – range ordering in austenite and martensite. The important feature of these systems is different diffusion mobility of metal and carbon atoms. Therefore, reorientation of the crystal lattice may occur simultaneously with the diffusion redistribution of carbon and alloying elements.

In the present article reviews the papers on mathematical modeling of diffusionless (martensitic) and diffusion phase transformations in steels under thermomechanical loading. There are two basic approaches to constructing models of the polymorphic transformations. The first method is based on an explicit introduction to the consideration of interfaces according to the conditions at the interface of a deformable material and the kinetics of the new phase. The second method involves the development of models based on the introduction of additional state parameters that characterize certain features of the material structure "on average" (for example, the concentration of a new phase), and the formulation of relations for them. Models used to describe the phase transitions are manifold. In the present review we present works that are considered and multi-level, and self-consistent, and direct model. We also consider the work that use gradient theory, which allows to take into account the impact of scale factors on the processes of phase transformations and behavior of the investigated steel.

Keywords: review, models, phase transformations, steels.

В сталях при термомеханической нагрузке наблюдаются все известные для твердого состояния фазовые превращения: перлитное, промежуточное (бейнитное) и мартенситное. Возможность протекания тех или иных фазовых превращений и их кинетика зависят как от состава стали, так и от параметров термомеханического воздействия, таких как температура, условия нагрева, длительность выдержки, скорость охлаждения, механическая нагрузка и т.п. Важной особенностью сталей является то, что при превращениях переохлажденного аустенита переход граничноцентрированной кубической (ГЦК) кристаллической решетки в объемноцентрированную тетрагональную (ОЦТ) решетку может происходить наряду с диффузионным перераспределением углерода и легирующих элементов. Переход $\gamma \rightarrow \alpha$ может осуществляться как по так называемому нормальному (если межфазная граница некогерентная), так и по мартенситному (если эта граница когерентная) механизмам. Как показывают многочисленные экспериментальные исследования, фазовые превращения являются причиной появления в материале определенного набора физических и механических свойств, которые в значительной степени зависят от микроструктуры материала, механизмов ее формирования и изменения. Корректное описание изменения структуры материалов дает возможность разработки новых методов получения материалов с заданным набором свойств и оптимизации уже существующих. Экспериментальное исследование данного вопроса является достаточно ресурсоемким, поэтому в механике деформируемого твердого тела актуальной становится задача построения моделей, описывающих состояние и эволюцию структуры материала с учетом твердотельных фазовых превращений.

Существует два основных подхода к построению моделей полиморфных превращений:

1. Явное введение в рассмотрение межфазных границ с учетом условий на границе фаз деформируемого материала и кинетики развития новой фазы.

2. Разработка моделей, основанных на введении дополнительных параметров состояния, характеризующих те или иные особенности структуры материала «в среднем» (например, концентрация новой фазы), и формулировке соотношений для них.

Явное введение в рассмотрение межфазных границ [1, 9] позволяет описывать фазовые превращения с точки зрения механики деформируемого твердого тела с использованием многих идей классической теории фазовых переходов Дж. Гиббса. Граница фаз упругого материала рассматривается как поверхность, на которой деформации при непрерывном поле перемещений претерпевают разрыв. Изменяющаяся в процессе фазового перехода микроструктура материала порождает собственные деформации превращения и изменение модулей упругости, поэтому область новой фазы является неоднородной, а на ее границе некоторые компоненты тензора деформаций могут претерпевать разрыв, что приводит к ограничениям на определяющие соотношения. Возникновение в упругом теле равновесного разрывного поля деформаций требует существования в пространстве деформаций областей, в которых нарушается неравенство Адамара, являющееся необходимым условием устойчивости по отношению к бесконечно малым деформациям. В случае равновесия на границе фаз ставятся следующие условия: сохранения сплошности, непрерывности усилия и термодинамическое условие, которое является аналогом равенства химических потенциалов в теории Гиббса. Последнее условие накладывает ограничения при определении формы границы фаз и соответствующих деформаций на границе, так как даже если определяющие соотношения допускают существование двухфазных состояний, не любые деформации могут иметь место на границе фаз. Это приводит к понятию зоны фазовых переходов, граница которой в пространстве деформаций определяет предельную поверхность превращения.

Метод фазового поля довольно часто применяется для моделирования как диффузионных, так и бездиффузионных (мартенситных) фазовых превращений на мезоуровне (моделируемая область состоит из нескольких зерен). Данный подход [14] предполагает наличие «размытой», «диффузионной» границы между фазами в отличие от классиче-

ских методов, использующих понятие «резкой границы», когда многофазная структура описывается положением границы и для каждой из областей множество дифференциальных уравнений решается совместно с уравнениями потока и конститутивными уравнениями на границе. В подходе «диффузионной границы» форма и взаимное расположение областей, занимаемых отдельными фазами, описываются совокупностью параметров, определяющих их доли φ_i [15, 38]. Значение параметра может изменяться от 0 до 1; $\varphi_i = 0$ соответствует области, где нет i фазы, $\varphi_i = 1$ соответствует однофазной области. Таким образом, микроструктуру (за исключением границ зерен, дефектов и т.п.) можно описать множеством однофазных областей, разделенных границами, на которых более одного значения φ_i отлично от нуля. Таким образом, в подходе «диффузионной границы» изменение формы областей (а значит, и положения границы) с течением времени неявно определяется изменением долей фаз. Изменение во времени долей фаз описывается кинетическим уравнением, получаемым в рамках термодинамики необратимых процессов, т.е. используется линейная связь скорости изменения долей фаз и производной термодинамического потенциала по данному параметру. Чаще всего исследуются фазовые превращения, происходящие в изотермических условиях, и в качестве термодинамического потенциала берется свободная энергия, но есть работы по изучению и неизотермических процессов, когда в качестве термодинамического потенциала выбирается энтропия [4, 28]. Свободная энергия обычно определяется суммой химической, упругой и «градиентной» составляющих. В работе [39] метод фазового поля использовался для анализа мартенситных превращений. Химическая энергия системы определяется интегралом по объему произведения степенной функции долей фаз различных вариантов мартенсита на движущую силу превращения, определяемую как разность свободной энергии исходной (аустенитной) фазы и мартенсита. Упругая энергия определяется обычным соотношением – интеграл по объему от свертки тензора упругих свойств с тензором упругих деформаций. «Градиентная» составляющая равна интегралу от суммы квадратов градиентов долей фаз по числу вариантов, умноженной на материальный параметр. Упругие деформации определяются разностью полных деформаций и так называемых собственных деформаций, которые, в свою очередь, описываются суммой трансформационной и пластической (в случае ее учета)

составляющих. Трансформационная составляющая находится по деформациям Бейна, для установления пластической деформации применяется деформационная теория пластичности (в предположении идеальной пластичности). Приведены примеры применения предлагаемой модели для случая плоско-деформированного состояния. Отмечается, что морфология мартенситной фазы полностью определяется аккомодацией поля внутренних напряжений. При этом аккомодация только за счет образования мартенсита ведет к тонкой структуре (игольчатой и тонкопластинчатой), при этом превращение происходит не полностью. Более сильное воздействие на аккомодацию имеют пластические деформации, при включении этой моды получается более грубая микроструктура (толстые пластины мартенсита), превращение идет практически до полного исчерпания аустенитной фазы.

Работа [34] посвящена моделированию диффузионных превращений в сталях. Упругая и градиентная составляющие свободной энергии определяются аналогично описанному выше. Химическая энергия, которая зависит от концентраций легирующих элементов и углерода, определяется интегралом по объему от суммы свободных энергий отдельных фаз, взвешенных с их долями. В данном случае пластическая деформация не учитывается, а трансформационная в рассмотренном примере ферритного превращения стали Fe–C 0,463 ат.%–Mn 0,496 ат.% берется равной 1 %. Помимо кинетического уравнения для долей фаз решаются уравнения диффузии для определения изменения концентраций легирующих элементов и углерода.

Кинетические макромодели очень часто применяются для описания процессов термомеханической обработки стальных изделий, при этом рассмотрение ведется на уровне целых конструкций. Для определения объемной доли мартенсита часто используется феноменологическое экспоненциальное соотношение Koistinen and Marburger [23]

$$\xi = \xi_A^0 \left[1 - e^{-k(M_s - \theta)} \right], \quad (1)$$

где ξ_A^0 – объемная доля аустенита в начальный момент; k – материальный параметр; M_s – температура начала мартенситного превращения. Для объемной доли фазы, образовавшейся по диффузионному механизму, обычно применяется уравнение Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov [10]

$$\xi = \xi^{\max} \left[1 - e^{-bt^n} \right], \quad (2)$$

где ξ^{\max} – предельная доля новой фазы; b, n – материальные параметры.

Все материальные параметры определяются по диаграмме изотермического превращения моделируемой стали [20]. Приведенные выше феноменологические соотношения для определения долей фаз получены при некоторых допущениях, а именно: полагается, что зародыши распределены в пространстве случайным образом, считается, что скорость роста не зависит от степени превращения и рост происходит с одинаковой скоростью во всех направлениях. Зависимость кинетики фазового превращения от приложенных напряжений учитывается через зависимости материальных параметров феноменологических законов от параметров внешнего воздействия. Например, в [21] предлагается следующая зависимость изменения температуры начала мартенситного превращения от средних напряжений σ_m и второго инварианта девиатора тензора напряжений I_2 :

$$\Delta M_s = A\sigma_m + BI_2^{1/2}, \quad (3)$$

A, B – материальные параметры, определяемые экспериментально.

В работе [19] предложена следующая зависимость параметра b в уравнении Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov от эффективных напряжений $\bar{\sigma}$:

$$b(\bar{\sigma}) = b(0)(1 + C\bar{\sigma}^D), \quad (4)$$

где C, D могут быть определены только регрессией экспериментальных данных и зависят от материала и типа фазового превращения.

Существует очень много работ, посвященных описанию поведения сталей с TRIP (Transformation-Induced Plasticity)-эффектом, т.е. пластичностью, наведенной фазовым (обычно мартенситным) превращением. Интерес к этим сталям объясняется их повышенной прочностью и одновременно пластичностью, т.е. при равной прочности (пределе текучести) TRIP-стали обладают в 2–3 раза большей пластичностью, что обеспечивает им преимущества в процессе штамповки и формования. Данное свойство TRIP-сталей является следствием связи между движением дислокации и мартенситным фазовым превраще-

нием посредством внутренних напряжений, создаваемых обоими неупругими процессами. Поведение рассматриваемых материалов в значительной степени зависит от температуры, поскольку кинетика мартенситного превращения связана с температурой через химическую энергию. Поскольку мартенситный фазовый переход имеет бездиффузионный характер и осуществляется кооперативным перемещением атомов, то как приложенные, так и внутренние напряжения способствуют превращению. Влияние пластической деформации на протекание фазового превращения сложнее. Мартенситное превращение начинается при охлаждении в отсутствие внешних напряжений при температуре начала мартенситного перехода. Выше этой температуры критические напряжения линейно растут с температурой до максимальной температуры, при которой мартенситное превращение возникает при «упругих» напряжениях. В этом диапазоне температур напряжения способствуют мартенситному превращению. Выше максимальной температуры, при которой переход возникает при «упругих» напряжениях, мартенситному превращению предшествует значительная пластическая деформация, что вытекает в образование дополнительных мест для зарождения новой фазы. В этом диапазоне температур, когда трансформационные критические напряжения значительно падают, фазовый переход, определяется как превращение, вызванное пластической деформацией. Отмеченные свойства прочности и пластичности TRIP-сталей, с одной стороны, являются результатом неупругой деформации, сопровождающей мартенситное превращение, а с другой – действия внутренних напряжений изменяющейся фазы, приводящие к дополнительному пластическому течению (TRIP-эффект). Также следует отметить, что в процессе превращения с одинаковой вероятностью может образовываться мартенсит 24 различных вариантов, поэтому приложенные и внутренние напряжения становятся причиной возникновения определенного набора ориентаций.

В [29] анализируется мартенситное превращение TRIP-стали. Принимается гипотеза аддитивности упругих, пластических, температурных, трансформационных составляющих деформаций и неупругой составляющей, обусловленной фазовыми превращениями для сталей, проявляющих TRIP-эффект. Упругая составляющая деформации определяется изотропным законом Гука с линейно зависящим от температуры модулем упругости. Скорость трансформационной деформации

принимается пропорциональной произведению девиатора напряжения и скорости изменения доли мартенсита. Для объемной доли мартенсита используется феноменологическое экспоненциальное соотношение Koistinen–Marburger. Температурные деформации определяются по правилу смеси, т.е. взвешенной с объемной долей суммой температурных деформаций аустенита и мартенсита. В свою очередь, температурные деформации аустенита и мартенсита определяются шаровой составляющей со своими коэффициентами термического расширения. Трансформационная составляющая также полагается шаровой, пропорциональной доле мартенситной фазы. Пластическая составляющая определяется соотношениями теории пластического течения с изотропным нелинейным упрочнением, учитывающим также долю мартенситной фазы. Для решения поставленной связанной нелинейной краевой задачи использована численная процедура, организованная как последовательность решения задач теплопроводности и упругопластичности. Реализация рассмотренных алгоритмов осуществляется с помощью метода конечных элементов. Для решения использован пакет ABAQUS. В работе представлен пример моделирования поведения цилиндрического вала с утолщением в центральной части при термическом нагружении.

Часто для моделирования мартенситных превращений на мезоуровне, когда моделируемая область представляет собой отдельное зерно или их совокупность, используется модель, основанная на физической теории пластичности, дополнительно учитывающей происходящие фазовые превращения. В представленной в [35] модели используется расширенное мультипликативное разложение градиента места, включающее, помимо упругой и пластической составляющих, и составляющую, которая отвечает за изменение конфигурации вследствие фазового превращения:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{f}^p \cdot \mathbf{f}^{tr}, \quad \mathbf{f}^{tr} = \mathbf{I} + \sum_{i=1} \xi^{(i)} \mathbf{b}^{(i)} \mathbf{d}^{(i)}, \quad (5)$$

где $\xi^{(i)}$ – объемная доля мартенсита варианта i ; $\mathbf{b}^{(i)}$ – вектор изменения конфигурации при мартенситном превращении; $\mathbf{d}^{(i)}$ – единичный вектор нормали к габитусной плоскости; суммирование ведется по всем вариантам превращения.

Поскольку мартенсит представляет собой хрупкую фазу, во многих случаях не склонную к пластическому течению, пластическая деформация часто ассоциируется только с аустенитной фазой. В рассматриваемой работе для определения соответствующей составляющей градиента места в представительном объеме используется взвешенное с объемной долей аустенита осреднение. Конститутивная модель строится с использованием термодинамического подхода. Для удельной (на единицу массы) энтропии вводится аддитивное разложение на упругую, пластическую и трансформационную составляющие. Скорость изменения пластической составляющей определяется суммой произведений меры изменения энтропии за счет сдвигов по каждой системе скольжения на скорость сдвига по соответствующим системам. Трансформационная составляющая определяется взвешенной суммой скрытой теплоты фазовых превращений по различным вариантам, деленной на температуру фазового перехода. Следуя процедуре, предложенной Колеманом и Ноллом, вводится функция диссипации, представляемая суммой произведений термодинамических сил и потоков. Общий вид определяющего соотношения и выражения для термодинамических сил получен из неравенства диссипации. От внутренней энергии, входящей в выражение для диссипации, осуществлен переход к свободной энергии Гельмгольца, которая записывается в виде суммы упругой, термической, поверхностной составляющих и энергии дефектов. Предложены конкретные выражения для каждой из введенных составляющих. По свободной энергии определяются движущие силы фазовых превращений и пластического деформирования. Сформулированы кинетические уравнения для соответствующих потоков (долей мартенсита по вариантам и скорости сдвигов по системам скольжения), критерий фазового перехода в терминах термодинамической силы, соотношение для микродеформаций, характеризующих дислокационную субструктуру, закон упрочнения. Для анализа возможностей предложенной модели рассмотрены тестовые задачи. В первой из них исследуется монокристалл аустенита высокоуглеродистой TRIP-стали при одноосном нагружении (растяжение и сжатие), простом сдвиге и всестороннем растяжении при различной ориентации осей кристаллографической системы координат по отношению к характерным направлениям воздействий. Приведены зависимости соответствующих компонент тензора напряжений Коши и суммарной (по всем вариан-

там) доли мартенсита от номинальной деформации для случаев учета и неучета пластического деформирования, показано и объяснено их существенное отличие. Исследован также вопрос зависимости напряжений и доли образующегося мартенсита от ориентации кристаллографических осей по отношению к осям нагружения. В качестве второго примера рассмотрено поведение фрагмента поликристалла двухфазной TRIP-стали, состоящего из зерна остаточного аустенита (ГЦК-решетка, 13 % объема), окруженного шестью зернами феррита (ОЦК), при одноосном растяжении до 15 % номинальной деформации. Зерна феррита могут испытывать только упругопластическое деформирование, остаточный аустенит – еще и фазовый переход. Рассматривались две группы экспериментов. В первой все зерна феррита одинаково ориентированы по отношению к оси растяжения, исследуются две ориентировки; для аустенита анализируются три ориентировки (итого – 6 вариантов расчетов). Во второй группе ориентация зерна также принималось одной из трех фиксированных, а для зерен феррита ориентация принималась случайной выборкой из 720 возможных. Приведены и детально описаны кривые напряжение–деформация и зависимости доли остаточного аустенита от деформации.

В работе [36] предложена многоуровневая модель для описания фазового перехода аустенит → мартенсит. В рассмотрение вводится четыре масштабных уровня: мезо-, верхний микро- и нижний микроуровень, уровень кристаллической решетки. Верхний микроуровень представляет собой пластины мартенсита (в окружении остаточного аустенита), которые, в свою очередь, состоят из чередующихся sdвойникованных вариантов мартенсита – элементов нижнего микроуровня. При переходе с нижнего микроуровня на верхний требуется выполнение совместности конфигураций мартенсита и аустенита, включая условия сопряжения по габитусной плоскости. Образование мартенсита описывается удлинением по нормали к габитусной плоскости и сдвигом параллельно габитусной плоскости. В работе полагается, что при фазовом превращении мартенситу энергетически выгоднее формироваться именно в виде пар sdвойникованных пластинок. Для совокупности таких пар пластинок вводится понятие «трансформационной системы», характеризуемой нормалью к габитусной плоскости и средним вектором сдвига, который определяется по градиенту места трансформационной системы. Градиент места, в свою очередь, определяется

взвешенной с объемными долями суммой градиентов места каждого из вариантов, входящих в рассматриваемую пару пластинок. Совокупность нескольких трансформационных систем с окружающим их аустенитом составляет представительный объем мезоуровня. В работе детально описывается кинематика при переходе от верхнего микроуровня к мезоуровню. Кинематические соотношения как на верхнем микроуровне, так и на мезоуровне основаны на мультипликативном разложении градиента места на упругую и трансформационную составляющие. Трансформационная составляющая градиента места определяется осреднением по всем трансформационным системам, входящим в представительный объем мезоуровня; для упругой составляющей принимается гипотеза о ее равенстве для всех фаз, входящих в этот объем. Определяющие соотношения получаются последовательным осреднением с нижнего микроуровня. Для каждой из фаз используется линейная зависимость второго тензора напряжений Пиола–Кирхгоффа от тензора упругих деформаций Коши–Грина, определенных в промежуточной (разгруженной) конфигурации. На каждом уровне, начиная с верхнего микроуровня, тензор эффективных упругих характеристик определяется осреднением с весовыми коэффициентами, определяющими объемную долю фаз, тензоров свойств элементов нижележащего уровня. Подробно описывается алгоритм определения матриц упругих характеристик для представительного объема верхнего микроуровня по характеристикам нижнего микроуровня. Термодинамическое описание процесса фазового превращения основано на линейной необратимой термодинамике Онзагера. Принимается гипотеза об аддитивном разложении энтропии на обратимую (упругую) и необратимую (трансформационную) составляющие; последняя определяется через скрытую теплоту фазового превращения. Из второго закона термодинамики в форме неравенства диссипации получены выражения для термодинамических сил с использованием различных термодинамических потенциалов – внутренней энергии, свободной энергии Гельмгольца и Гиббса. В качестве критерия фазового перехода принято достижение термодинамической силой на трансформационной системе соответствующего критического значения. Также в статье приведены примеры применения предлагаемой модели для анализа монотонного и реверсивного одноосного нагружения, простого сдвига и всестороннего растяжения – сжатия монокристалла аустенита при различной ориентировке кристалла по отношению к осям нагружения.

Работа [26] посвящена моделированию поведения сталей, обладающих TRIP-эффектом. Принимается, что скорость роста объемной доли каждого варианта мартенсита определяется скоростью образования зародышей новой фазы (в единице объема), равной производной по времени от произведения числа возможных мест образования зародышей в аустените на вероятность их активизации [31]. Количество возможных зародышей определяется числом пересечений полос сдвига в исходной фазе; последнее, в свою очередь, определяется по пластическим деформациям в аустените. Вероятность активизации зародыша в отсутствие внешних приложенных напряжений одинакова для всех геометрических мест зародышей и определяется разностью термодинамического потенциала Гиббса («химической свободной энергии») между аустенитом и мартенситом, зависящей от разности температуры начала мартенситного перехода и текущей температуры. При действии напряжений к химической свободной энергии варианта добавляется механическая энергия, определяемая сверткой тензора напряжений и тензора деформации превращения по рассматриваемому варианту. Для описания кинематики мартенситного превращения принимается обычное мультипликативное разложение градиента места, в котором упругая составляющая описывает упругие искажения и жесткие ротации, неупругая – пластические и трансформационные деформации, причем пластическими сдвигами в мартенситной фазе пренебрегают. В работе детально рассматривается кинематика мартенситного превращения. Предполагается, что градиент места для всего кристаллита в каждый момент времени одинаков, как для области аустенита, так и испытавшей превращение. Ориентация решетки мартенсита по каждому варианту считается одинаковой в каждый момент процесса. Решетка мартенсита ориентирована по отношению к аустениту согласно соотношениям Курдюмова–Закса; в то же время взаимоориентация вариантов мартенсита по отношению друг к другу может быть произвольной, т.е. каждый из вариантов трансформируется независимо от других. Подробно рассматривается градиент трансформационной составляющей, представляемой совокупностью деформации Бейна и простого сдвига, оставляющих инвариантной плоскость сопряжения двух фаз. Приведено описание процедуры численной реализации модели. Экспериментальные исследования проведены для образцов из нержавеющей стали 204М (с высоким содержанием хрома и марганца),

подвергнутых одноосному растяжению в широком диапазоне скоростей деформаций ($1,3 \times 10^{-4} - 1,3 \times 10^{-1} \text{ с}^{-1}$). Детально анализируются результаты численного моделирования, отмечается их хорошее соответствие экспериментальным данным.

Работа [22] также посвящена исследованию сталей, обладающих TRIP-эффектом, и в ней отмечается существенное влияние геометрических характеристик, таких как ориентация и форма мартенситных включений, взаиморасположение фаз, на происходящие в указанных сталях процессы. С целью учета этой особенности рассматривается так называемая единичная ячейка (зерно аустенита с включением мартенсита эллипсоидальной формы). Принимается гипотеза об аддитивном разложении тензора полной деформации скорости на упругую, пластическую, температурную и трансформационную составляющие. Для пластической составляющей используется закон пластического течения. В функцию текучести включен третий инвариант девиатора тензора напряжений Коши, что позволяет учитывать анизотропию поведения материала при растяжении и сжатии, показанную экспериментально. Температурные деформации сводятся к шаровой составляющей, что не позволяет учесть возможную анизотропию. Трансформационные деформации в каждой точке определяются суммой известных деформаций по реализующимся наборам из 24 возможных вариантов. Трансформационные деформации для отдельных вариантов представляются деформацией удлинения по одной из осей и сдвигом по нормали к этой оси в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Определяющие соотношения записаны в скоростной релаксационной форме закона Гука. Для случая больших градиентов перемещений предлагается использовать производную Яуманна взвешенного тензора Кирхгоффа. В работе рассматриваются неизотермические процессы, при записи уравнения теплопроводности учитываются пластическая диссипация и теплота фазового превращения. Предполагается, что макрообъем составлен из «базовых ячеек», каждая из которых, в свою очередь, состоит из периодических «единичных ячеек». Переход от ячеек к макрообъему осуществляется с помощью процедуры гомогенизации, подробно описанной в статье. Для описания изменения долей всех вариантов мартенсита используется модель, предложенная Олсоном [31], описание которой приведено выше. Значительная часть рассматриваемой статьи посвящена описанию и анализу результатов числен-

ных расчетов. Реализация модели и на макроуровне (тело в целом), и на ячейке периодичности осуществляется с помощью метода конечных элементов. Рассматривается плоская задача о растяжении полосы (размеры 3×5 мм); температура окружающей среды – 150 и 250 К, скорость деформирования – 5×10^{-4} и 50 с^{-1} ; форма мартенситных включений – эллиптическая с ориентацией главной оси эллипсоида по отношению к оси нагружения под углом 0 и 45° . Приведены результаты расчетов температуры, доли мартенситной фазы, напряженно-деформированного состояния для указанных условий нагружения как для макрообразца, так и для единичной ячейки. Исследуется влияние на деформирование, рост мартенситной фазы и температуру трансформационных деформаций скрытой теплоты фазовых превращений, формы и ориентации зародышей мартенсита.

Работа [16] посвящена исследованию мартенситных фазовых превращений с акцентом на стали, обнаруживающие способность к неупругому деформированию в процессе превращений. Полные деформации на мезо- и макроуровне полагаются состоящими из упругих, фазовых, пластических и температурных, последние полагаются малыми и исключаются из дальнейшего рассмотрения. Для величин макроуровня используется осреднение по объему с учетом долей фаз различных вариантов мартенсита. Для трансформационной составляющей скорости деформаций учитывается скачок деформации на границе аустенит-мартенсит через скорость перемещения границы. Двухфазная система аустенит–мартенсит рассматривается как термодинамически неравновесная система с диссипацией. Принимается, что для описания ее эволюции может быть использован принцип максимума диссипации. Для квазистатического изотермического случая, рассматриваемого в статье, мощность диссипации определяется разностью между мощностью внешних сил и скоростью изменения свободной энергии Гельмгольца. Свободная удельная (на единицу объема) энергия Гельмгольца полагается состоящей из химической энергии, поверхностной энергии и энергии упругого деформирования. Приращение свободной химической энергии выражается разностью соответствующих свободных химических энергий мартенсита и аустенита, умноженных на объемную долю мартенсита, и принимается линейной функцией температуры. Упругая энергия определяется сверткой напряжений и разности полных и фазовых деформаций. Изменение свободной энергии, свя-

занной с наличием межфазных границ, вводится через скачки химической и упругой энергии и скорость движения границы. Член, связанный с разрывами на границе раздела фаз, появляется и в мощности внешних сил. В терминах указанных параметров получено выражение для мощности диссипации. Для определения напряжений и деформаций на мезоуровне используется самосогласованная вязкопластическая модель, в которой рассматривается поведение отдельного включения мартенситной фазы, имеющего эллиптическую форму, заключенного в матрицу с эффективными характеристиками аустенита. В обеих фазах предполагается возможность пластического деформирования, реализуемого сдвигами по соответствующим системам скольжения. При этом в мартенситной фазе учитываются не только деформации, происходящие в уже сформировавшейся новой фазе, но и унаследованные пластические деформации, имевшие место в родительской аустенитной фазе. В каждой из фаз учитывается неизотропное упрочнение, причем при записи выражения для критического напряжения сдвигу в мартенсите также рассматривается упрочнение, имевшее место в аустенитной фазе. В качестве критерия фазового превращения используется силовой критерий по аналогии с пластическим деформированием. Критические напряжения фазовых превращений линейно связаны с накопленными сдвигами в аустените и долями мартенсита. В статье приведен тестовый пример расчета процесса мартенситного превращения (включая кривую напряжение–деформация) для случая простого сдвига на макроуровне, отмечается качественное соответствие теоретических результатов известным экспериментальным данным.

Двухуровневая модель, пригодная для описания TRIP-сталей, рассматривается в [17]. Для анализа были выбраны уровень представительного макрообъема (макроуровень) и уровень кристаллитов или отдельных фаз (мезоуровень). Рассмотрение ведется в предположении малости градиентов перемещений. На макроуровне полные деформации представляются суммой упругой, термической, пластической и трансформационной составляющих. Трансформационная деформация определяется суммой шаровой составляющей, описывающей изменение объема решетки, и девиаторной части, характеризующей искажение решетки. Аналогичное разложение полной деформации принято на мезоуровне для каждой точки представительного макрообъема. Деформации макроуровня определяются осреднением деформаций с ме-

зоуровня, взвешенных с объемными долями соответствующих фаз. Для определения напряжений в каждой из фаз используется самосогласованная модель, основные соотношения которой представлены в работах [13, 24]. Основное отличие заключается в том, что вместо девиаторов неупругих макро- и мезодеформаций вводятся дополнительные внутренние переменные, характеризующие неупругие деформации макро- и мезоуровня, для которых формулируются эволюционные уравнения. В качестве условия текучести на мезоуровне используется закон комбинированного упрочнения. Для учета анизотропии трансформационного изменения формы условие Мизеса модифицируется введением в него третьего инварианта разности девиатора мезонапряжений и остаточных микронапряжений. Приведены эволюционные уравнения для параметров изотропного и кинематического упрочнения. Предложено эволюционное уравнение для скорости изменения доли мартенситной фазы на мезоуровне, включающее «потенциал превращения», зависящий от эффективных напряжений (разности действующих напряжений и остаточных микронапряжений), деформаций и температуры. Второй раздел посвящен идентификации и верификации модели на основе имеющихся в литературе экспериментальных данных для анализируемой стареющей стали. Приведены и подробно проанализированы результаты расчетов, показано их удовлетворительное соответствие экспериментальным данным.

Трехуровневая модель для исследования поведения TRIP-сталей и метастабильных аустенитных сталей рассмотрена в статье [25]. Элементом макроуровня является представительный макрообъем, состоящий из множества зерен. Элементом мезоуровня считается зерно, которое изначально является однофазным (аустенит). Полный градиент места на мезоуровне определяется на основании гипотезы Фойгта или с использованием более сложной, например самосогласованной, модели. Каждый элемент мезоуровня подразделяется на совокупность элементов микроуровня, состоящих из остаточного аустенита и пластин мартенсита различных вариантов. Элементом микроуровня является подобласть зерна в виде пластинки, состоящей из двух слоев (аустенита и мартенсита) и ориентированной параллельно габитусной плоскости варианта, причем в слой мартенсита «собираются» все образования мартенсита данного варианта. Полные градиенты места для элемента микроуровня полагаются известными. Напряжения в отдельном эле-

менте микроуровня определяются осреднением по пластине. Напряжения на мезоуровне находятся осреднением напряжений по всем элементам микроуровня. В статье детально рассматривается модель микроуровня. На межфазной границе принимается условие Адамара для скачка градиента места (т.е. разрыв может иметь место только в направлении нормали к габитусной плоскости) и равенство векторов напряжений в фазах. Подробно рассматривается кинематика каждой из фаз, основанная на мультипликативном разложении. Для мартенсита введен сомножитель, описывающий трансформационную составляющую деформации. Рассматриваются изотермические процессы, теплота фазовых превращений и диссипированное тепло не учитываются. Для каждой из фаз вводятся свободная энергия Гельмгольца, уравнение поверхности текучести и диссипативная функция. Свободная энергия полагается зависящей от упругой составляющей градиента места и внутренней переменной, представляющей собой накопленную пластическую деформацию. Для мартенсита пластическая деформация определяется суммой двух составляющих: накопленной в аустените к моменту превращения и приобретенной в мартенситной фазе. Свободная энергия представляется суммой химической, упругой и «накопленной пластической» составляющих, причем в статье предложен конкретный вид для каждой из этих составляющих. Функция текучести зависит от тензора напряжений Кирхгоффа и параметра упрочнения, являющегося энергетически сопряженной величиной к переменной, описывающей накопленные пластические деформации. Диссипативная функция определяется разностью совершаемой над телом механической работы и свободной энергии Гельмгольца. Из неравенства диссипации получен гиперупругий закон для каждой из фаз в форме зависимости взвешенного тензора Кирхгоффа от меры Фингера. Выражение для движущей силы и критерий фазового превращения также были получены из неравенства диссипации. Соотношения для накопленной пластической деформации получены с помощью принципа максимума диссипации. Для иллюстрации возможностей модели рассматривается деформирование монокристаллической метастабильной аустенитной нержавеющей стали с низким ($\leq 0,05$ %) содержанием углерода и высоким содержанием никеля и хрома. Приведены полученные кривые σ - ϵ и зависимость доли мартенсита от деформации при одноосном растяжении и сжатии вдоль направления $[0\ 1\ 0]$; показано, что при растяже-

нии доля мартенсита нарастает быстрее, кривая σ - ϵ при растяжении идет ниже кривой при сжатии (и кривой σ - ϵ в аустените, которая не зависит от вида нагружения). Представлены также результаты расчета зависимости от деформации доли мартенсита по различным вариантам. Для сравнения рассматриваются аналогичные результаты для монокристаллов при одноосном растяжении и сжатии вдоль направлений $[0\ 1\ 0]$ и $[1\ 1\ 1]$. Приведены результаты расчета при одноосном растяжении до 14 % деформации для поликристаллического агрегата из 125 зерен кубической формы (1 конечный элемент на зерно) с начальным равномерным распределением ориентаций. Показана неоднородность распределения доли мартенсита по рассматриваемому объему. Приведены кривые σ - ϵ для аустенитной стали, аустенита при запрещенных превращениях и смеси аустенита и мартенсита (при соответствующей каждому уровню деформации доле мартенсита), продемонстрирован TRIP-эффект для стали, претерпевающей мартенситные превращения, кривая σ - ϵ идет существенно ниже аналогичной кривой для смеси.

В [30] для исследования влияния на процессы фазовых превращений и упрочнение TRIP-сталей масштабных факторов предлагается использовать градиентную модель Флека и Хатчинсона [18], в которой в эффективную пластическую деформацию входит слагаемое со сверткой градиента интенсивности пластической деформации. Для вывода разрешающих соотношений используется принцип виртуальных перемещений в скоростной форме, модифицированный включением члена с градиентом интенсивности скорости пластической деформации и сопряженной этой независимой переменной термодинамической силы. В связи с появлением этих новых переменных возникает необходимость в дополнительных граничных условиях, которые также рассматриваются в данной статье. При расчетах использована пошаговая процедура и метод конечных элементов с аппроксимацией области каждой фазы большим числом элементов. Объектом исследования является ячейка композита, состоящего из кругового цилиндрического включения остаточного аустенита в окружении ферритной матрицы. Рассматривается двумерная задача по одноосному растяжению при постоянной температуре. Собственно критерий зарождения и роста мартенситной фазы не рассматривается, предполагается, что превращение происходит однородно, мартенситная фаза имеет линзообразную цилиндриче-

скую форму с заданной долей мартенсита (от 0 до 6 % от доли аустенита), главные оси линзы (описываемой эллипсом) наклонены к оси растяжения под углом 45° . В процессе трансформации выделенная область получает предписанную деформацию растяжения вдоль короткой оси эллипса и сдвиг в плоскости поперечного сечения эллиптического цилиндра. Превращение начинается при достижении осредненной деформации в аустените предписанной стартовой деформации превращения. Описание трансформационной деформации реализуется с помощью искусственного приема: в области превращения по линейному закону изменяется температура, при этом требуемые деформации обеспечиваются за счет анизотропного тензора термических искажений. Одновременно по линейному закону изменяются свойства области превращения (от аустенита к мартенситу). После завершения превращения термическое нагружение прекращается и осуществляется возврат к механическому нагружению уже трехфазной области. В статье приведены результаты расчетов, в которых детально исследуется влияние на отклик материала (по сути, кривой одноосное напряжение – одноосная деформация, осредненных по элементарной ячейке) масштабного фактора, типа граничных условий на внутренних границах фаз и упругих и пластических областей, объемной доли остаточного аустенита и доли мартенситной фазы.

Модель, ориентированная на исследование влияния размера зерна на мартенситное превращение в многофазных сталях и их вклад в упрочнение стали в целом, рассматривается в [33]. Поликристаллический агрегат представляется набором зерен аустенита с эллиптическими включениями мартенситной фазы и феррита. Кроме того, полагается, что каждая из рассматриваемых фаз содержит дискретный набор дислокаций. Для каждого из элементов системы, включая и дислокации, вводятся поля перемещений, деформаций и напряжений. Поля напряжений и деформаций в каждой из фаз связаны изотропным упругим законом. Помимо этого, вводятся так называемые дополнительные поля деформаций и напряжений, возникающие из-за различия упругих характеристик фаз. Расположение источников образования дислокаций и зародышей мартенситной фазы определяется с использованием гауссова распределения. В статье приведены критерии активизации источников дислокации и зародышей мартенсита, соотношения для скоростей движения дислокаций и роста зародышей мартенсита, происхо-

дящих в габитусной плоскости. Границы зерен различных фаз считаются непроходимыми препятствиями и для дислокаций, и для включений мартенсита. В работе обсуждается кинематика неупругого деформирования, происходящего за счет скольжения краевых дислокаций и деформаций превращения. Рассматривается задача деформирования образца прямоугольного поперечного сечения в плоско-деформированном состоянии при задании скорости перемещения вдоль нормали двух параллельных сторон области и запрещения движения по нормали к двум другим. Детально исследуется влияние размеров зерен на поведение материала при деформировании. Для построения зеренной структуры применяются многоугольники Вороного; исследуется три группы образцов с различным средним размером зерна (аустенита – 1,92, 1,12 и 0,72 мкм, феррита – 1,34, 0,96 и 0,68 мкм), во всех случаях доля аустенитной фазы в отсчетном состоянии составляла 15 %. Для каждого образца проводились два вида расчетов: с подавлением источников фазовых превращений и с одновременной работой обоих типов источников (дислокаций и превращения). Приведены зависимости продольного осредненного по объему напряжения и плотности дислокаций от продольной деформации, осреднение проведено как по всему объему, так и отдельно для зерен феррита и аустенита с мартенситом. Проведен детальный анализ результатов расчетов, направленный на определение 1) вклада индуцированных фазовыми превращениями пластических деформаций, 2) влияния размеров зерна на деформирование, 3) перекрестных эффектов (т.е. влияние размеров зерна на TRIP-эффект и превращений на эффект Холла-Петча).

Двухуровневая модель, предназначенная для анализа связанных термомеханических процессов (включая фазовые превращения, реализуемые диффузионным путем), рассматривается в [27]. На макроуровне используется метод конечных элементов, каждой точке интегрирования в котором приписывается множество кристаллитов (не менее представительного объема макроуровня). На мезоуровне применяется вязкопластическая модель, учитывающая скольжение дислокаций и двойникование. Для связи переменных макро- и мезоуровня предлагается использовать либо гипотезу Фойгта, которая для кристаллов с высокой симметрией работает довольно хорошо, либо самосогласованную схему; напряжения предлагается определять в любом случае осреднением по представительному макрообъему. Итерационная про-

цедура на макроуровне основана на методе Ньютона–Рафсона (Ньютона–Канторовича), тензор тангенциальной (или секущей) жесткости определяется по осредненным в каждый момент времени характеристикам элементов мезоуровня. Обсуждаются различные пути организации численных процедур, позволяющие сократить время вычислений. Рассматриваются алгоритмы переопределения параметров макро- и мезоуровня (в первую очередь – совокупности ориентаций кристаллитов, приписанных точкам интегрирования) при перестройках конечно-элементной сетки в случае больших искажений лагранжевой сетки. Фазовые превращения (аустенит → феррит), осуществляемые по диффузионному механизму, описываются с помощью феноменологической модели.

В [11] наряду с мартенситными рассматриваются диффузионные превращения – бейнитные и перлитные. Основываясь на экспериментальных данных [32], авторы исследуют влияние предшествующего пластического деформирования на фазовые превращения. Модель основана на прямом использовании метода конечных элементов. Рассматривается кубическая область, содержащая некоторое количество зародышей новой фазы. Свойства материала в каждом элементе полагаются однородными, соответствующими исходной или получающейся фазе (перлиту, бейниту или мартенситу). Собственно, сами процессы фазовых превращений и критерии их начала не рассматриваются, а предполагается, что, начиная с зародышей новой фазы, превращение переходит на следующие слои конечных элементов по предписанной геометрии, испытывая при этом соответствующие деформации фазового превращения и изменение свойств от исходной фазы к фазе – продукту. Для каждой точки интегрирования применяется теория пластического течения с изотропным или кинематическим законом упрочнения. Для деформации принимается аддитивное разложение на упругую, пластическую и трансформационную составляющие, последняя предполагается шаровой. Рассматривается одноосное нагружение, прикладываемое на одной из граней куба (противоположная грань закреплена); при этом исследуется влияние на результаты двух типов условий на этой грани: 1) свободных смещений узлов, 2) сохранение плоскостности и перпендикулярности оси нагружения нагружаемой грани; параллельно анализируется влияние на результаты разбиения исследуемой области на КЭ и используемый закон упрочнения (изотропный или кинематический).

Основная часть результатов получена для одиночного зародыша новой фазы, расположенного в одной из вершин куба; приведены предварительные результаты расчетов для конечного числа зародышей, разбросанных по случайному закону.

Описанию диффузионного твердотельного фазового превращения (аустенит \rightarrow феррит) посвящена статья [12]. Исходная зеренная микроструктура строится с помощью многогранников Вороного со случайным разбросом вершин. Полученная зеренная структура в дальнейшем покрывается конечно-элементной сеткой с определенным количеством элементов, приходящихся на отдельное зерно. Полагается, что местами образования зародышей новой фазы могут быть тройные стыки зерен, ребра и грани. Отмечается, что процесс зарождения новой фазы носит «гетерогенный» характер, что подтверждается экспериментами. Однако в некоторых случаях для материалов, подвергнутых предварительной пластической деформации, имеет место «гомогенное» зарождение новой фазы внутри зерна. Скорость роста новой фазы полагается изотропной и постоянной. Для исследования напряженно-деформированного состояния используется прямая упруговязкопластическая модель первого типа [7, 8]. Принимается гипотеза аддитивности упругой, вязкопластической и трансформационной составляющих тензора малых деформаций. Упругие деформации связаны с тензором напряжений Коши анизотропным законом Гука. Скорости вязкопластических деформаций устанавливаются степенным законом, упрочнение по системам скольжения принято комбинированным. Для описания переходной области от исходной к конечной фазе используются достаточно малые по размерам элементы, в которых имеют место фазовые деформации, определяемые шаровым тензором. Для оценки влияния пластических деформаций в переходной области рассматривались два варианта численных расчетов. В первом пластические деформации осуществлялись сдвигами по системам скольжения обеих фаз, с изменяющимися критическими напряжениями по каждому из типов систем, так что в начальной стадии превращения критические напряжения по системам скольжения новой фазы весьма велики и скольжение по этим системам практически не происходит, а по системам, представляющим старую фазу, критические напряжения равны аналогичным в исходной фазе; в конце превращения ситуация зеркально переворачивается. Во втором варианте скольжение по всем системам скольжения запреще-

ны. Результаты расчетов показывают, что при малых размерах элементов переходной фазы наличие или отсутствие пластических деформаций в ней мало сказываются на полях напряжений и деформаций исследуемой области. В заключительной части статьи приведены примеры численного исследования напряженно-деформированного состояния в процессе фазового превращения при различных условиях нагружения (свободный от внешних воздействий образец, одноосное растяжение, одноосное растяжение, сопровождаемое сжатием, образцы с предшествующей пластической деформацией и без нее).

В работе [37] для изучения изменения микроструктуры (образование феррита и перлита) при распаде аустенита применяется метод клеточных автоматов. Зарождение феррита может происходить только на границе зерна, а перлита – на межфазной границе аустенит – феррит (из-за накопления здесь углерода) или в объеме зерна. Предполагается, что на границе зерна существует некоторое число мест, в которых может зародиться феррит. Потенциальное место образования феррита становится активным при условии, что достигнута соответствующая степень переохлаждения, а время выдержки при данных условиях превысило время инкубационного периода при текущей температуре. При непрерывном охлаждении инкубационное время для всех температур ниже температуры равновесного перехода суммируется. Зарождение происходит при значении суммы, превышающем единицу. Зарождение перлита происходит аналогичным образом. Произвольно выбранное место в зерне связано с определенной степенью переохлаждения для активации образования перлита. В работе приведено выражение для определения степени переохлаждения с учетом возможности образования карбида. И для феррита, и для перлита применяется простая экспоненциальная зависимость изменения числа зародышей от степени переохлаждения. Для вычисления инкубационного периода применяется степенной закон. Предполагается, что рост феррита определяется диффузией углерода в аустените. На границе аустенит–феррит выполняются условия равновесия, а процесс движения границы контролируется условием баланса раствора на границе. При ферритном превращении средняя концентрация углерода в ячейке изменяется из-за диффузии и рассчитывается из закона Фика. Феррит растет до тех пор, пока диффузия не становится слишком медленной из-за падения температуры или не начинается зарождение перлита на границе феррит–аустенит

и его последующий рост. Рост феррита прекращается, когда степень переохлаждения превысит соответствующее значение для зарождения перлита, а инкубационное условие для зарождения перлита будет выполнено. Приведены соотношения для вычисления скорости роста перлита. Расчетная область представляет собой отдельное аустенитное зерно, а ее граница – межзеренную границу. Моделирование осуществляется на квадратной сетке. Граница зерна – одномерная линия, совпадающая с границей квадрата. Равноудаленные точки на границе обозначают потенциально возможные места роста феррита. Эти узлы делят границу на одномерные ячейки. Каждой ячейке в соответствие ставится параметр состояния, характеризующий фазу внутри ячейки. Параметр 1 соответствует непревращенному аустениту. Когда ячейка, в которой возможно зарождение феррита, становится активной, параметр состояния меняется на 2, что означает, что данная ячейка соответствует границе раздела фаз феррит–аустенит. После этого в ячейке моделируется рост феррита. Зародыши перлита могут возникать на границе феррит–аустенит или в объеме зерна. Таким образом, перлит может образовываться в ячейках с параметрами состояния 1 или 2. Когда условия образования перлита выполнены, параметр состояния становится равным 3. Ячейка, где аустенит полностью превратился в феррит, имеет параметр 4, а в перлит или смесь феррита и перлита – 5. Первый этап моделирования – это задание активизационной степени переохлаждения, которая необходима для зарождения феррита в граничных ячейках и перлита во внутренних ячейках. Для каждого значения степени переохлаждения вычисляется вероятность образования зародыша в ячейке. Если вероятность достаточна для зарождения, то данная степень переохлаждения предписывается ячейке в качестве активизационной. При моделировании превращения в условиях непрерывного охлаждения температура уменьшается с некоторой заданной скоростью и рассчитанное при каждой температуре инкубационное время суммируется. Когда превышено значение переохлаждения и время инкубационного периода больше 1, начинается моделирование зарождения и роста феррита или перлита в соответствии с определенной моделью роста. Каждая ячейка в системе характеризуется параметром состояния, концентрацией углерода в аустените, концентрацией углерода в феррите, средней концентрацией углерода, долей феррита и перлита. Изначально параметр состояния системы равен 1, заданы

равные концентрации углерода и средняя концентрация, доли феррита и перлита равны 0. Когда температура понижается, в некоторых ячейках на границе начинается образование феррита, который растет с определенной скоростью. Параметр состояния ячейки, где есть граница феррит–аустенит, становится равным 2, а граница аустенит–перлит – 3. Позиция межфазной границы отслеживается по скорости роста в каждой превращающейся ячейке. Зная позицию границы, можно определить долю феррита или перлита в каждой превращенной ячейке. Изменение концентрации углерода в ячейках при росте феррита вычисляется с использованием закона Фика с источником, связанным с фазовым переходом аустенита в феррит. Когда феррит заполняет ячейку, параметр состояния изменяет свое состояние на 3. При росте перлита происходит лишь перераспределение углерода, поэтому концентрация углерода в ячейках не изменяется. Концентрация углерода в ячейках с растущим перлитом принимается равной эвтектоидной. Моделирование идет до тех пор, пока не будет достигнута температура начала мартенситного перехода или весь аустенит не превратится в феррит или перлит.

В работах [5, 6] предложена микромеханическая модель нелинейного деформирования сплавов с эффектом памяти формы (способность восстанавливать исходную форму при нагреве через интервал мартенситных превращений после предварительного деформирования в низкотемпературной мартенситной фазе) при прямом и обратном превращениях. Рассматривается представительный объем поликристаллического материала. Вводится минимальный структурный элемент, который может находиться либо в аустенитном, либо в мартенситном состоянии, – микрообъем. Также вводится мезоэлемент – совокупность микрообъемов, принадлежащих одной мартенситной пластине, т. е. совокупность микрообъемов, примыкающих друг к другу и имеющих одну и ту же ориентацию. Объемная доля мартенситной фазы равна отношению числа микрообъемов, находящихся в мартенситном состоянии, к общему числу микрообъемов (считается постоянным). Увеличение доли мартенсита происходит как за счет развития уже имеющихся мезоскопических мартенситных элементов, так и за счет зарождения новых микрообъемов. Ориентация кристаллографической деформации в первом случае не зависит от действующих напряжений, а идентична ориентации микрообъемов, составляющих мезо-

элемент, во втором же случае ориентация кристаллографической деформации определяется действующими в них напряжениями. Процесс обратного превращения сводится к уменьшению до нуля объема мартенситных элементов. Путем подсчета вероятностей различных ориентаций образующихся и переориентирующихся мартенситных элементов были получены соотношения для приращения фазовой деформации представительного объема. Полученные определяющие соотношения позволили качественно правильно описать накопление деформаций прямого превращения, явления ориентированного превращения, монотонной и обратимой памяти формы.

В [2, 3] предложена динамическая теория мартенситного превращения в сплавах железа. В этих материалах процесс превращения реализуется за счет кооперативной перестройки решетки и происходит со сверхзвуковой скоростью в областях исходного аустенита, что позволяет уйти от моделей подвижности межфазной границы и сосредоточиться на волновом управлении процессом роста кристалла мартенсита. Отмечается, что высокая скорость роста требует гетерогенного зарождения, т. е. явного участия дефектов, а волновой характер роста мартенсита требует существования начального колебательного возбужденного состояния решетки в упругом поле дефектов. Именно поэтому не нужно конструирование квазиравновесного зародыша путем обособления некоторой области исходной фазы конфигурированными наборами дислокационных петель. Было установлено, что упругое поле дефекта в области зарождения новой фазы снижает энергетический барьер для старта плоской деформации с инвариантной плоскостью. Роль элемента, в котором осуществляется коллективный переход атомов через энергетический барьер, играет трехмерная ячейка, имеющая форму прямоугольного параллелепипеда. Грани параллелепипеда попарно колеблются в противофазе, стимулируя деформацию растяжение-сжатие во взаимно ортогональных направлениях, которые совпадают с направлением распространения волн, излучаемых колеблющимся параллелепипедом. Так, решетка теряет устойчивость и в местах, где налагаются волновые пучки с благоприятным для осуществления деформации полем смещения атомов, образуются области в форме пластинок. Таким образом, формирование пластинок мартенсита рассматривается как перемещение параллелепипеда с некоторой скоростью, определяемой скоростями волновых пучков. В работе изложен алгоритм расчета

ориентаций габитусных плоскостей, связанных с распространением управляющего волнового процесса. При аналитическом описании смещений и деформаций решетки в области локализации начального возбужденного состояния используется гармоническая форма. Представлена система волновых уравнений, отражающих взаимодействие двух пучков с ортогональными волновыми векторами. Взаимодействие волн выражается через зависимость коэффициентов затухания от деформаций. Авторами утверждается, что динамическая теория не уступает в точности имеющимся подходам, например, при определении кристаллографической ориентации габитусов, макросдвига, межфазных ориентационных соотношений.

Приведен краткий обзор работ, посвященных математическому моделированию как бездиффузионных (мартенситных), так и диффузионных фазовых превращений, происходящих в сталях при термомеханической нагрузке. Обзор не претендует на полноту, поскольку число работ по данному направлению весьма интенсивно растет. Выбор источников определяется потенциальной возможностью развития рассматриваемых моделей для более точного описания фазовых превращений при термомеханическом воздействии и, конечно, не лишен субъективности.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект №13-01-96006-урал_a), а также гранта ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 годы» (мероприятие 1.2.2, Соглашение 14.В37.21.0382).

Библиографический список

1. Гринфельд М.А. Методы механики сплошных сред в теории фазовых превращений. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1990. – 312 с.
2. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Динамическая теория γ - α мартенситного превращения в сплавах железа и решение проблемы критического размера зерна / НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Ижев. ин-т компьютерных исслед. – М.; Ижевск, 2010. – 132 с.
3. Кащенко М.П., Чащина В.Г. Формирование мартенситных кристаллов в предельном случае сверхзвуковой скорости роста // Письма о материалах. – 2011. – Т. 1. – С. 7–14.

4. Лебедев В.Г., Данилов Д.А., Галенко П.К. Об уравнениях модели фазового поля для неизотермической кинетики превращений в многокомпонентной и многофазной системе // Вестн. Удмурт. ун-та. Физика и химия. – 2010. – Вып. 1. – С. 26–33.

5. Мовчан А.А., Мовчан И.А. Одномерная микромеханическая модель нелинейного деформирования сплавов с памятью формы при прямом и обратном термоупругих превращениях // Механика композиционных материалов и конструкций. – 2007. – Т. 13. – № 3. – С. 297–322.

6. Мовчан А.А., Мовчан И.А., Сильченко Л.Г. Микромеханическая модель нелинейного деформирования сплавов с памятью формы при фазовых и структурных превращениях // Изв. Рос. акад. наук. Механика твердого тела. – 2010. – № 3. – С. 118–130.

7. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – № 4. – С. 17–28.

8. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14. – № 4. – С. 5–30.

9. Фрейдин А.Б., Шарипова Л.Л. Равновесные двухфазные деформации и зоны фазовых переходов в приближении малых деформаций // Изв. вузов. Северо-Кавказский регион. Естественные науки. Нелинейные проблемы механики сплошных сред. Спецвып. – 2003. – С. 291–298.

10. Avrami M. Kinetics of phase change. II: transformation–time relations for random distribution of nuclei // Journal of Chemical Physics. – 1940. – Vol. 8. – P. 212.

11. Barbe F., Quey R., Taleb L. Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. Case of a cubic array of nuclei // Europ. J. Mechanics A/Solids. – 2007. – Vol. 26. – P. 611–625.

12. Barbe F., Quey R. A numerical modelling of 3D polycrystal-to-polycrystal diffusive phase transformations involving crystal plasticity // Int. J. Plasticity. – 2011. – Vol. 27. – P. 823–840.

13. Berveiller M., Zaoui A. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals // J. Mech. Phys. Solids. – 1979. – Vol. 26. – P. 325–344.

14. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a non-uniform systems. I. Interfacial free energy // J. Chem. Phys. – 1958. – Vol. 28. – P. 258–266.

15. Chen L.-Q., Khachaturyan A. Computer simulation of structural transformations during precipitation of an ordered intermetallic phase // *Acta Mater.* – 1991. – Vol. 39 – P. 2533–2551.

16. Cherkaoui M., Berveiller M., Sabar H. Micromechanical modeling of martensitic transformation induced plasticity (trip) in austenitic single crystals // *Int. J. Plasticity.* – 1998. – Vol. 14. – No.7. – P. 597–626.

17. Fischlschweiger M., Cailletaud G., Antretter T. A mean-field model for transformation induced plasticity including backstress effects for non-proportional loadings // *Int. J. Plasticity.* – 2012. – Vol. 37. – P. 53–71.

18. Fleck N.A., Hutchinson J.W. A reformulation of strain gradient plasticity // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2001. – Vol. 49. – P. 2245–2271.

19. Hsu T.Y. Additivity Hypothesis and Effects of Stress on Phase Transformations in Steel // *Current Opinion in Solid State & Materials Science.* – 2005. – Vol. 9. – P. 256–268.

20. Hübler I. Mathematische Untersuchungen eines gekoppelten Systems von ODE und PDE zur Modellierung von Phasenumwandlungen im Stahl. Diplomarbeit im Studiengang Technomathematik, Universität Bremen, 2007. – 100 p.

21. Inoue T., Wang, Z.G. Coupling between stresses, temperature and metallic structural during processes involving phase transformation // *Mater. Sci. Technol.* – 1985. – Vol. 1. – P. 845–850.

22. Iwamoto T. Multiscale computational simulation of deformation behavior of TRIP steel with growth of martensitic particles in unit cell by asymptotic homogenization method // *Int. J. Plasticity.* – 2004. – Vol. 20. – P. 841–869.

23. Koistinen D.P., Marburger R.E. A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels // *Acta Metallurgica.* – 1959. – Vol. 7. – P. 59–60.

24. Kroner E. Zur plastischen verformung des vielkristalls // *Acta Metall.* – 1961. – Vol. 9. – P. 155–161.

25. Kouznetsova V.G., Geers M.G.D. A multi-scale model of martensitic transformation plasticity // *Mechanics of Materials.* – 2008. – Vol. 40. – P. 641–657.

26. Lee M.-G., Kim S.-J., Han H.N. Crystal plasticity finite element modeling of mechanically induced martensitic transformation (MIMT) in metastable austenite // *Int. J. Plasticity.* – 2010. – Vol. 26. – P. 688–710.

27. Logé R.E., Chastel Y.B. Coupling the thermal and mechanical fields to metallurgical evolutions within a finite element description of a forming process // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* – 2006. – Vol. 195. – P. 6843–6857.

28. Loginova I., Amberg G., Agren J. Phase-field simulations of non-isothermally binary alloy solidification // *Acta Materialia.* – 2001. – Vol. 49. – P. 573–581.

29. Mahnken R., Schneidt A., Antretter T. Macro modelling and homogenization for transformation induced plasticity of a low-alloy steel // *Int. J. Plasticity.* – 2009. – Vol. 25. – P. 183–204.

30. Mazzoni-Leduc L., Pardoën T., Massart T.J. Strain gradient plasticity analysis of transformation induced plasticity in multiphase steels // *Int. J. Solids and Structures.* – 2008. – Vol. 45. – P. 5397–5418.

31. Olson G.B., Cohen M. Kinetics of strain-induced martensitic nucleation // *Metallurgical Transactions A.* – 1975. – Vol. 6A. – P. 791–795.

32. Petit-Grostabussiat S., Taleb L., Jullien J.-F. Experimental results on classical plasticity of steels subjected to structural transformations // *Int. J. Plasticity.* – 2004. – Vol. 20. – P. 1371–1386.

33. Shi J., Turteltaub S., Van der Giessen E. Analysis of grain size effects on transformation-induced plasticity based on a discrete dislocation–transformation model // *J. Mech. Phys. Solids.* – 2010. – Vol. 58. – P. 1863–1878.

34. Steinbach I., Apel M. Multi-phase field model for solid state transformation with elastic strain // *Physica D.* – 2006. – Vol. 217. – P. 153–160.

35. Tjahjanto D. D., Turteltaub S., Suiker A. S. J. Crystallographically based model for transformation-induced plasticity in multiphase carbon steels // *Continuum Mech. Thermodyn.* – 2008. – Vol. 19. – P. 399–422.

36. Turteltaub S., Suiker A.S.J. A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations // *Int. J. Solids and Structures.* – 2005. – doi:10.1016/j.ijsolstr.2005.06.065.

37. Varma M. R., Sasikumar R., Pillai S.G.K. Cellular automaton simulation of microstructure evolution during austenite decomposition under continuous cooling conditions // *Bull. Mater. Sci.* – 2001. – Vol. 24. – No. 3. – P. 305–312.

38. Wang Y., Chen L.-Q., Khachaturyan A.G. Kinetics of strain-induced morphological transformation in cubic alloys with a miscibility gap // *Acta Metall. Mater.* – 1993. – Vol. 41. – No. 1. – P. 279–296.

39. Yamanaka A., Takaki T., Tomita Y. Elastoplastic phase-field simulation of martensitic transformation with plastic deformation in polycrystal // *Int. J. Mech. Sci.* – 2010. – Vol. 52. – P. 245–250.

References

1. Grinfeld M.A. *Metody mekhaniki sploshnykh sred v teorii fazovykh prevrashcheniy* [Methods of continuum mechanics in the theory of phase transitions]. Moscow: Nauka, 1990. 312 p.

2. Kashchenko M.P., Chashchina V.G. *Dinamicheskaya teoriya γ – α martensitnogo prevrashcheniya v splavakh zheleza i reshenie problemy kriticheskogo razmera zerna* [Dynamic theory of γ – α martensite phase transformation in Fe-based alloys and problem of grain critical size]. Moscow, Izhevsk: NITS Regularnaya i khaoticheskaya dinamika, Izhevskiy institute kompyuternykh issledovaniy, 2010, 132 p.

3. Kashchenko M.P., Chashchina V.G. *Formirovanie martensitnykh kristallov v predelnom sluchae sverkhzvukovoy skorosti rosta* [Formation of martensitic crystals in the limiting case of supersonic growth speed]. *Pisma o materialakh*, 2011, vol. 1, pp. 7-14.

4. Lebedev V.G., Danilov D.A., Galenko P.K. *Ob uravneniyakh modeli fazovogo polya dlya neizotermicheskoy kinetiki prevrashcheniya v mnogokomponentnykh i mnogofaznykh sistemakh* [Phase-field model equations for non isothermal kinetics of transitions in a multi-component and multi-phase system]. *Vestnik Udmurtskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika i Khimiya*, 2010, iss. 1, pp. 26-33.

5. Movchan A.A., Movchan I.A. *Odnomernaya mikromekhanicheskaya model nelineynogo deformirovaniya splavov s pamyatyu formy pri pryamom i obratnom termouprigikh prevrashcheniyakh* [One-dimensional micromechanical model of the nonlinear deformation of shape memory alloys for forward and reverse thermoelastic transformations]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruktsiy*, 2007, vol. 13, no. 3, pp. 297-322.

6. Movchan A.A., Movchan I.A., Silchenko L.G. *Mikromekhanicheskaya model nelineynogo deformirovaniya splavov s pamyatyu formy pri fazovykh i strukturnykh prevrashcheniyakh* [Micromechanical model of the nonlinear deformation of shape memory alloys during phase and structural transformations]. *Izvestiya Rossiyskoy akademii nauk. Mekhanika tverdogo tela*, 2010, no. 3, pp. 118-130.

7. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevye fizicheskiy modeli mono- i polikristallov. Statisticheskie modeli [Multilevel physical models of single- and polycrystals. Statistical models]. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2011, no. 4, pp. 17-28.

8. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevye fizicheskiy modeli mono- i polikristallov. Pryamye modeli [Multilevel physical models of single- and polycrystals. Direct models]. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2011, vol. 14, no. 4, pp. 5-30.

9. Freidin A.B., Sharipova L.L. Ravnovesnye dvukhfaznye deformatsii i zony fazovykh perekhodov v priblizhenii malykh deformatsiy [Equilibrium two-phase deformations and phase transitions zones in the small strain]. *Izvestiya vuzov Severo-Kavkazskogo regiona. Nelineynye problemy mekhaniki sploshnykh sred. Special Issue*, 2003, pp. 291-298.

10. Avrami, M. Kinetics of phase change. II: transformation-time relations for random distribution of nuclei. *Journal of Chemical Physics*, 1940, vol. 8, pp. 212.

11. Barbe F., Quey R., Taleb L. Numerical modelling of the plasticity induced during diffusive transformation. Case of a cubic array of nuclei. *Europ. J. Mechanics A/Solids*, 2007, vol. 26, pp.611-625.

12. Barbe F., Quey R. A numerical modelling of 3D polycrystal-to-polycrystal diffusive phase transformations involving crystal plasticity. *Int. J. Plasticity*, 2011, vol. 27, pp. 823-840.

13. Berveiller M., Zaoui A. An extension of the self-consistent scheme to plastically-flowing polycrystals. *J. Mech. Phys. Solids*, 1979, vol. 26, pp. 325-344.

14. Cahn J.W., Hilliard J.E. Free energy of a non-uniform systems. I. Interfacial free energy. *J. Chem. Phys*, 1958, vol. 28, pp. 258-266.

15. Chen L.-Q., Khachaturyan A. Computer simulation of structural transformations during precipitation of an ordered intermetallic phase. *Acta Mater*, 1991, vol. 39, pp. 2533-2551.

16. Cherkaoui M., Berveiller M., Sabar H. Micromechanical modeling of martensitic transformation induced plasticity (trip) in austenitic single crystals. *Int. J. Plasticity*, 1998, vol. 14, no.7, pp. 597-626.

17. Fischlschweiger M., Cailletaud G., Antretter T.A mean-field model for transformation induced plasticity including backstress effects for non-proportional loadings. *Int. J. Plasticity*, 2012, vol. 37, p. 53-71.

18. Fleck N.A., Hutchinson J.W. A reformulation of strain gradient plasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 2001, vol. 49, pp. 2245-2271.

19. Hsu T.Y. Additivity Hypothesis and Effects of Stress on Phase Transformations in Steel. *Current Opinion in Solid State & Materials Science*, 2005, vol. 9, pp. 256-268.

20. Hüßler I. Mathematische Untersuchungen eines gekoppelten Systems von ODE und PDE zur Modellierung von Phasenumwandlungen im Stahl, Diplomarbeit im Studiengang Technomathematik, *Universität Bremen*, 2007, 100 p.

21. Inoue T., Wang, Z.G. Coupling between stresses, temperature and metallic structural during processes involving phase transformation. *Mater. Sci. Technol.*, 1985, vol. 1, pp. 845-850.

22. Iwamoto T. Multiscale computational simulation of deformation behavior of TRIP steel with growth of martensitic particles in unit cell by asymptotic homogenization method. *Int. J. Plasticity*, 2004, vol. 20, p. 841-869.

23. Koistinen D.P., Marburger R.E. A general equation prescribing the extent of the austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. *Acta Metallurgica*, 1959, vol. 7, pp. 59-60.

24. Kroner E. Zur plastischen verformung des vielkristalls. *Acta Metall*, 1961, vol. 9, pp. 155-161.

25. Kouznetsova V.G., Geers M.G.D. A multi-scale model of martensitic transformation plasticity. *Mechanics of Materials*, 2008, vol. 40, pp. 641-657.

26. Lee M.-G., Kim S.-J., Han H.N. Crystal plasticity finite element modeling of mechanically induced martensitic transformation (MIMT) in metastable austenite. *Int. J. Plasticity*, 2010, vol. 26, pp. 688-710.

27. Logé R.E., Chastel Y.B. Coupling the thermal and mechanical fields to metallurgical evolutions within a finite element description of a forming process. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 2006, vol.195, pp. 6843-6857.

28. Loginova I., Amberg G., Agren J. Phase-field simulations of non-isothermally binary alloy solidification. *Acta. Materialia*, 2001, vol. 49, pp. 573-581.

29. Mahnken R., Schneidt A., Antretter T. Macro modelling and homogenization for transformation induced plasticity of a low-alloy steel. *Int. J. Plasticity*, 2009, vol. 25, pp. 183-204.

30. Mazzoni-Leduc L., Pardoën T., Massart T.J. Strain gradient plasticity analysis of transformation induced plasticity in multiphase steels. *Int. J. Solids and Structures*, 2008, vol. 45, pp. 5397-5418.

31. Olson G.B., Cohen M. Kinetics of strain-induced martensitic nucleation. *Metallurgical Transactions A*, 1975, vol. 6A, pp. 791-795.

32. Petit-Grostabussiat S., Taleb L., Jullien J.-F. Experimental results on classical plasticity of steels subjected to structural transformations. *Int. J. Plasticity*, 2004, vol. 20, pp. 1371-1386.

33. Shi J., Turteltaub S., Van der Giessen E. Analysis of grain size effects on transformation-induced plasticity based on a discrete dislocation-transformation model. *J. Mech. Phys. Solids*, 2010, vol. 58, pp. 1863-1878.

34. Steinbach I., Apel M. Multi-phase field model for solid state transformation with elastic strain. *Physica D*, 2006, vol. 217, pp. 153-160.

35. Tjahjanto D.D., Turteltaub S., Suiker A.S.J. Crystallographically based model for transformation-induced plasticity in multiphase carbon steels. *Continuum Mech. Thermodyn*, 2008, vol. 19, pp. 399-422.

36. Turteltaub S., Suiker A.S.J. A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations. *Int. J. Solids and Structures*, 2005, doi:10.1016/j.ijsolstr.2005.06.065.

37. Varma M. R., Sasikumar R., Pillai S. G. K. Cellular automaton simulation of microstructure evolution during austenite decomposition under continuous cooling conditions. *Bull. Mater. Sci.*, 2001, vol. 24, no. 3, pp. 305-312.

38. Wang Y., Chen L.-Q., Khachaturyan A.G. Kinetics of strain-induced morphological transformation in cubic alloys with a miscibility gap. *Acta Metall. Mater.*, 1993, vol. 41, no. 1, pp. 279-296.

39. Yamanaka A., Takaki T., Tomita Y. Elastoplastic phase-field simulation of martensitic transformation with plastic deformation in polycrystal. *Int. J. Mech. Sci.*, 2010, vol. 52, pp. 245-250.

Об авторах

Исупова Ирина Леонидовна (Пермь, Россия) – аспирантка кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: enotyforever@yandex.ru).

Трусов Петр Валентинович (Пермь, Россия) – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru).

About the authors

Isupova Irina Leonidovna (Perm, Russian Federation) – postgraduate student, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., 614990, Perm, Russian Federation, e-mail: enotyforever@yandex.ru).

Trusov Peter Valentinovich (Perm, Russian Federation) – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (29, Komsomolsky av., 614990, Perm, Russian Federation, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru).

Получено 16.07. 2013