

**А.И. Швейкин, В.Н. Ашихмин, П.В. Трусов**

Пермский государственный технический университет

## **О моделях ротации решетки при деформировании металлов**

Often used in texture modeling ways of the lattice rotation description (the full-constraints Taylor model and the model connecting lattice rotation with material turn defined orthogonal tensor accompanying elastic deformation) are analyzed. Communication of lattice spins received in these models is determined. The single crystal tensile and compression is examined, corresponding modeling results are analyzed

Процессы неупругого деформирования и свойства поликристаллических материалов на макроуровне, как показывают многочисленные экспериментальные и теоретические исследования, весьма чувствительны к изменению мезо- и микроструктуры материала. Поэтому при разработке конститутивных соотношений в нелинейной механике деформируемого твердого тела одной из наиболее актуальных проблем является построение моделей, описывающих эволюцию мезо- и микроструктуры поликристаллических материалов.

В частности, известно, что практически любая интенсивная пластическая деформация, за исключением деформации по схеме, близкой к всестороннему сжатию, сопровождается образованием в поликристаллическом материале кристаллографической текстуры того или иного типа и той или иной интенсивности [1]. Под кристаллографической текстурой понимается отличие закона распределения ориентаций решеток зерен в представительном объеме от равномерного, наличие выделенных (преимущественных) направлений в пространственной ориентировке кристаллических решеток отдельных составных частей (зерен, субзерен) поликристаллического тела. Вследствие образования текстуры поликристаллический материал приобретает анизотропию свойств, что существенным образом влияет на эксплуатационные свойства изделий. Таким образом, актуальность построения адекватной модели текстурообразования (модели описания эволюции функции распределения ориентаций решеток зерен в представительном объеме) подтверждается достаточно острой необходимостью её применения для исследования технологических процессов с целью улучшения свойств материала и предотвращения негативных эффектов.

Имеются, по крайней мере, две возможности учета эволюции мезо- и микроструктуры: неявным или явным способом [2, 3]. В первом случае

в структуру определяющих соотношений вводятся достаточно сложные операторы над историей макроагружения (макродеформации), без использования соответствующих параметров, описывающих собственно эволюцию мезо- и микроструктуры. Как правило, при этом трудно выявить и обосновать физический смысл и 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 [2, 3]. Необходимо заметить, что при этом история воздействий не отбрасывается – она содержится во внутренних переменных.

В контексте данного подхода в настоящее время неупругое деформирование представительного объема поликристалла описывают с использованием прямых [4, 5 и др.] или статистических [6, 7 и др.] моделей (так называемых физических теорий пластичности).

Прямые модели, предполагающие решение краевых задач на уровне зерен (мезоуровне) с использованием, как правило, метода конечных элементов, позволяют более точно находить распределение напряжений и деформаций в области, учитывать ближнее и дальнее взаимодействие зерен. Однако применение данного подхода ввиду больших вычислительных затрат и сложности генерации расчетной области, соответствующей реальному материалу, обычно ограничено модельным двумерным случаем.

Статистические модели в вычислительном плане более эффективны и активно применяются для моделирования неупругого деформирования реальных материалов. В рамках этих моделей поликристалл рассматривается как совокупность различно ориентированных зерен-монокристаллов, воздействие с макроуровня на каждое зерно реализуется с использованием гипотезы Фойгта об однородности деформаций (для большинства моделей) или гипотезы Рейсса об однородности напряжений; в качестве механизма неупругого деформирования зерна принимается внутризеренное скольжение краевых дислокаций; отклик представительного объема определяется тем или иным осреднением откликов отдельных зерен.

Вне зависимости от способа описания внутризеренного неупругого деформирования (активно используются упругопластическая, вязкопластическая и упруговязкопластическая модели для описания скольжения дислокаций), для описания поворота решетки зерна в подавляющем большинстве существующих работ используется либо модель стесненного поворота Тейлора [6], либо модель, связывающая поворот решетки с материальным поворотом, определяемым ортогональным тензором, сопровождающим упругую деформацию [7]. При этом приведенные в литературе результаты моделиро-

вания одинаковых процессов деформирования, в частности – распределение ориентаций решеток зерен в представительном объеме, при использовании обеих моделей оказываются весьма близкими.

Настоящая статья ориентирована на анализ указанных моделей поворота решетки. Структура двухуровневой модели деформирования поликристаллических материалов с использованием для описания неупругого поведения зерна упругопластической модели, а также алгоритм решения краевых задач с её помощью достаточно детально изложены в [3], в данной статье для замкнутости кратко излагается только модель упругопластического деформирования зерна.

### 1. Модель внутриверного неупругого деформирования за счет скольжения краевых дислокаций

В качестве механизма неупругого деформирования принимается внутриверное скольжение краевых дислокаций. Плоскости залегания и ориентация векторов Бюргерса, вдоль которых преимущественно осуществляется трансляционное движение (скольжение) краевых дислокаций, известны, ими являются наиболее плотно упакованные плоскости и направления. Например, в ГЦК–металлах скольжение краевых дислокаций осуществляется в плоскостях системы  $\{111\}$  по направлениям  $\langle 110 \rangle$ , число таких возможных систем скольжения равно 12. Для описания каждой системы скольжения вводятся векторы  $\mathbf{n}^k, \mathbf{b}^k$  – единичные векторы нормали и направления скольжения (вдоль направления вектора Бюргерса) для  $k$ -й системы скольжения и  $\mathbf{m}^k$  – ориентационный тензор,  $\mathbf{m}^k = 1/2(\mathbf{b}^k \mathbf{n}^k + \mathbf{n}^k \mathbf{b}^k)$ ,  $k = 1, \dots, 12$ .

Распределение дислокаций полагается однородным по зерну, что дает возможность рассмотрения неупругой составляющей тензора деформации скорости  $\mathbf{d}^p$  в виде

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

где  $\dot{\gamma}^{(k)}$  – скорость сдвига по  $k$ -й системе скольжения,  $K$  – число систем скольжения. Видно, что неупругие деформации изохоричны.

В качестве критерия активности сдвига (скольжения дислокаций) по системе скольжения в упругопластических моделях используется закон Шмида:

$$\tau_k \equiv \mathbf{m}^k : \boldsymbol{\sigma} = \tau_k^c, \quad (2)$$

где  $\tau_k$  – действующее в системе скольжения  $k$  касательное напряжение,  $\boldsymbol{\sigma}$  – однородный по рассматриваемому зерну тензор напряжений Коши,  $\tau_k^c$  – кри-

тическое напряжение сдвига в той же системе скольжения, зависящее от накопленных сдвигов по всем системам скольжения (вообще говоря, эта зависимость может быть достаточно сложной).

В качестве базовой модели зерна (монокристалла) предлагается использовать физическую теорию Линя [8]. В этой модели элементом статистической выборки, как и в наиболее популярных для описания упругопластического деформирования моделях Тейлора–Бишопа–Хилла [6], является зерно, но в отличие от последних учитываются упругие деформации и анизотропия упругих свойств материала зерна (отметим, что первоначально модель была предложена для упруго изотропных зерен).

На мезоуровне (уровне зерна) в качестве определяющего соотношения выступает закон Гука в скоростной форме, при этом учитывается анизотропия кристаллической решетки:

$$\boldsymbol{\sigma}^r = \mathbf{c} : \mathbf{d}^e = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p), \quad \dot{\boldsymbol{\sigma}}^r = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \quad (3)$$

где  $\mathbf{c}$  – тензор четвертого ранга упругих свойств, его компоненты в кристаллографической системе координат (КСК) известны, для определения компонент  $\mathbf{c}$  в других системах координат используются стандартные преобразования;  $\mathbf{d}$ ,  $\mathbf{d}^e$ ,  $\mathbf{d}^p$  – тензор деформации скорости, его упругая и пластическая составляющие. В соотношении (3) учитывается геометрическая нелинейность (первоначально модель Линя была сформулирована для случая малых деформаций): квазитвердое движение [9] связывается с решеткой – в коротационной производной тензора напряжений Коши  $\boldsymbol{\sigma}^r$  фигурирует тензор спина  $\boldsymbol{\Omega}$ , характеризующий скорость вращения кристаллической решетки (модели поворота решетки рассматриваются ниже). Таким образом, напряжения характеризуют именно упругие взаимодействия в зерне, связанные с изменением расстояний между соседними атомами.

Основная идея модели Линя заключается в точном обеспечении движения изображающей точки в пространстве напряжений внутри или по поверхности многогранника текучести с точным определением активных в текущий момент систем скольжения.

Для известного (определенного алгоритмически) набора активных (для которых выполняется условие (2)) систем скольжения (СС) в текущий момент времени при наличии поворотов система уравнений в скоростях имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}^k) = f'(\gamma_\Sigma) \sum_{i=1}^{K_a} \dot{\gamma}^i, \quad k=1, \dots, K_a, \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \\ \mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^{K_a} \mathbf{m}^k \dot{\gamma}^k, \\ \mathbf{d} = \mathbf{D}, \\ \text{уравнения для определения спина решетки } \boldsymbol{\Omega}, \end{array} \right. \quad (4)$$

где  $f(\gamma_\Sigma)$  – функция упрочнения (критическое напряжение сдвига по системам скольжения, зависящее от накопленных по всем СС сдвигам  $\gamma_\Sigma$ ), штрих означает производную по  $\gamma_\Sigma$ ,  $K_a$  – число активных систем скольжения,  $K$  – общее число систем скольжения.

Уравнения (4)<sub>1</sub> – требование равенства скорости касательного напряжения на активной системе скольжения скорости критического напряжения для этой системы скольжения (требование выполнения (2) для активных систем скольжения),

(4)<sub>2</sub> – закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности (3),

(4)<sub>3</sub> – кинематическое соотношение (1),

(4)<sub>4</sub> – гипотеза Фойгта (в модели Линя используется гипотеза Фойгта, тензор деформации скорости макроуровня  $\mathbf{D}$  определяются из решения краевой задачи на макроуровне),

(4)<sub>5</sub> – соотношения той или иной модели поворота решетки.

Явными внутренними (входящими в связь отклика  $\boldsymbol{\sigma}$  и воздействия  $\mathbf{d} = \mathbf{D}$ ) переменными мезоуровня (подробно структура конститутивной модели с внутренними переменными обсуждается в [2]) являются скорости пластических деформаций и спин решетки. Скорости пластических сдвигов и критические напряжения сдвига для систем скольжения можно отнести к неявным внутренним переменным мезоуровня (не входят напрямую в связь отклика и воздействий, используются для определения явных внутренних переменных).

В качестве альтернативной вышеприведенной модели часто используются вязкие, вязкопластические, упруговязкопластические модели. Наиболее популярным законом для этого класса моделей являются различные модификации степенного закона Хатчинсона [10]:

$$\dot{\gamma}_k = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_k}{\tau_k^c} \right|^{1/m} \text{sign}(\tau_k), \quad (5)$$

где  $\dot{\gamma}_0, \tau_k^c$  – константы материала размерности деформации скорости и напряжения, соответственно,  $m$  – константа скоростной чувствительности материала (при комнатной температуре ее величина мала, не превышает 0,03); для вязкопластических и упруговязкопластических моделей необходимо в (5) добавить функцию Хэвисайда  $H(\tau_s - \tau_s^c)$  – критерий активности сдвига по СС. Несмотря на то, что в этом случае скольжение реализуется по всем системам скольжения, скорости сдвигов по СС, считающиеся активными в упругопластических моделях, существенно превосходят скорости сдвигов в остальных системах; напряжения при этом не существенно отличаются от получаемых в нечувствительных к скорости деформации упругопластических моделях. Достаточно детально вопрос об эквивалентности вязкопластической и жесткопластической моделей исследован в работе [11].

При этом описание поворота решетки зерна во всех моделях рассматривается как отдельный блок.

## 2. Модели ротации решетки

Наиболее популярными моделями поворота решетки являются: модель стесненного поворота Тейлора, определяющая спин решетки как разность тензора вихря и антисимметричной части тензора пластических сдвигов, и модель, связывающая поворот решетки с материальным поворотом, определяемым ортогональным тензором, сопровождающим упругую деформацию.

### 2.1. Стесненный поворот по Тейлору

Согласно модели стесненного поворота Тейлора в современной интерпретации [6] градиент скорости перемещений на мезоуровне (уровне зерна) представляется в виде

$$\mathbf{l} = (\hat{\nabla} \mathbf{v})^T = \mathbf{\Omega}_1 + \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}^i \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i, \quad (6)$$

где  $\hat{\nabla}$  – оператор Гамильтона, определенный в актуальной конфигурации,  $\mathbf{\Omega}_1$  – антисимметричный тензор спина решетки зерна, остальные величины определены выше. Соотношение (6) предполагает для связи мезо- и макроуровней модели (вместо первоначально используемой самим Тейлором [12]

гипотезы однородности деформаций (гипотезы Фойгта)) использование «расширенной» гипотезы Фойгта, устанавливающей однородность градиентов скоростей перемещений  $\mathbf{I} = \mathbf{L}$ , что и требуется в современных моделях текстурообразования. В силу того, что в рамках этой гипотезы материал полагается «стесненным» (деформации зерен ограничены соседями), модель Тейлора часто называют «полностью стесненной».

С учетом  $\mathbf{I} = \mathbf{L}$  из соотношения (6) тензор спина решетки зерна  $\mathbf{\Omega}_1$  можно выразить следующим образом:

$$\mathbf{\Omega}_1 = \mathbf{W} - \mathbf{W}^p = \mathbf{W} + \sum_{i=1}^K \frac{1}{2} \dot{\gamma}^i (\mathbf{n}^i \mathbf{b}^i - \mathbf{b}^i \mathbf{n}^i), \quad (7)$$

где  $\mathbf{W}$  – тензор вихря,  $\mathbf{W} = \frac{1}{2} \left( (\hat{\nabla} \mathbf{v})^T - \hat{\nabla} \mathbf{v} \right) = \frac{1}{2} (\mathbf{L} - \mathbf{L}^T)$ .

Отметим, что первоначально модель поворота решетки Тейлора была предложена для жесткопластической модели внутризеренного деформирования, поэтому анализ (7) логично провести для такой модели. Тогда при отсутствии скольжения дислокаций деформирование отсутствует, вращение решетки зерна согласно (7) описывается тензором вихря  $\mathbf{\Omega}_1 = \mathbf{W}$  – зерно вращается как жесткое тело, что соответствует представлению движения согласно теореме Коши–Гельмгольца [9].

Рассмотрим простой сдвиг в направлении  $\mathbf{k}_1$  ( $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$  – базисные векторы декартовой ортогональной системы координат), лагранжев закон движения:

$$\mathbf{r} = (q^1 + at q^2) \mathbf{k}_1 + q^2 \mathbf{k}_2 + q^3 \mathbf{k}_3, \quad a = \text{const}, \quad (8)$$

где  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор в актуальной конфигурации,  $q^i$  – лагранжевы координаты.

Градиент деформации для движения (8):

$$\mathbf{F} = \left( \overset{0}{\nabla} \mathbf{r} \right)^T = \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 + at \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3, \quad (9)$$

где  $\overset{0}{\nabla}$  – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации.

Градиент скорости перемещений в актуальной конфигурации, тензоры вихря и деформации скорости имеют вид:

$$\left( \hat{\nabla} \mathbf{v} \right)^T = \mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = a \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \quad (10)$$

$$\mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1), \quad \mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^T + \mathbf{L}) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1). \quad (11)$$

Пусть скольжение осуществляется по единственной системе скольжения  $\mathbf{b}, \mathbf{n}$ , тогда согласно жесткопластической модели  $\mathbf{D} = \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{bn} + \mathbf{nb})$ . Если кристалл ориентирован так, что  $\mathbf{b} = \mathbf{k}_1$ ,  $\mathbf{n} = \mathbf{k}_2$ , то имеем

$$\mathbf{D} = \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{bn} + \mathbf{nb}) = \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1),$$

откуда  $\dot{\gamma} = a$ . Тогда согласно (7),(11) спин решетки

$$\boldsymbol{\Omega}_1 = \mathbf{W} + \frac{\dot{\gamma}}{2}(\mathbf{nb} - \mathbf{bn}) = \frac{a}{2}(\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1) + \frac{a}{2}(\mathbf{k}_2\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2) = \mathbf{0}. \quad (12)$$

Следовательно, если кристалл идеально ориентирован для сдвига по одной системе скольжения, то поворот решетки отсутствует, несмотря на формоизменение зерна.

Таким образом, согласно модели стесненного поворота Тейлора соотношение (7) определяет поворот решетки зерна как разность между вихрем и антисимметричной частью тензора пластических сдвигов, при этом последняя может компенсировать вращательное внешнее воздействие на решетку за счет вихря.

## 2.2. Модель «материального» поворота

Другим популярным для описания поворотов решетки является следующий подход [9]: для описания кинематики используется мультипликативное разложение Ли градиента места, поворот решетки связывается с материальным поворотом, который определяется ортогональным тензором  $\mathbf{R}^c$ , сопровождающим упругую деформацию.

Отметим, что при использовании данной модели, как и при использовании модели стесненного поворота Тейлора, необходима «расширенная» гипотеза Фойгта, предполагающая однородность градиентов деформации  $\mathbf{f} = \mathbf{F}$  (градиентов скоростей перемещений  $\mathbf{I} = \mathbf{L}$ ).

Градиент деформации  $\mathbf{F}$  (транспонированный градиент места), линейно связывающий материальные отрезки  $d\mathbf{R}$  в отсчетной  $K_0$  и  $d\mathbf{r}$  в текущей  $K_t$  конфигурациях ( $d\mathbf{r} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{R}$ ), представляется мультипликативным разложением упругой и пластической составляющих градиента деформации [9]:

$$\mathbf{F} = \left( \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r} \right)^T = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p = \left( \nabla^{\times} \mathbf{r} \right)^T \cdot \left( \overset{\circ}{\nabla} \mathbf{r}^{\times} \right)^T, \quad (13)$$



где  $\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{r}^\times$  – радиус-векторы частицы в отсчетной  $K_0$ , актуальной  $K_t$  и промежуточной (разгруженной)  $K_x$  конфигурациях (последняя получается текущей разгрузкой до достижения нулевых напряжений),  $\nabla^\times$  – оператор Гамильтона, определенный в  $K_x$ .

Упругая составляющая градиента деформации  $\mathbf{F}^e$  представляется в виде полярного разложения

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{U}^e = \mathbf{V}^e \cdot \mathbf{R}^e. \quad (14)$$

Материальный поворот связывают с ортогональным тензором  $\mathbf{R}^e$ , сопровождающим упругую деформацию (называемым также тензором ротации [9]).

Пластическая составляющая градиента деформации определяется соотношением:

$$\dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}_i \mathbf{b}_i \mathbf{n}_i, \quad (15)$$

где векторы  $\mathbf{b}_i, \mathbf{n}_i$  – единичные векторы в направлении вектора Бюргера (направления сдвига) и нормали для системы скольжения, определенные в отсчетной конфигурации.

Таким образом, в результате воздействия (деформирования) произвольное зерно с некоторой ориентацией испытывает пластические сдвиги (без изменения ориентации решетки), упругие искажения и повороты; с последними связывается квазитвердое движение (конечные повороты как жесткого целого) [9], которое, в свою очередь, в рамках рассматриваемой модели и описывает поворот решетки зерна.

### 2.3. Сравнение моделей ротации решетки

Для сравнения (с математической точки зрения) вышеприведенных моделей поворота решетки необходимо для модели «материального» поворота определить спин решетки.

Рассмотрим градиент скорости перемещений; с учетом (13) можно записать:

$$\mathbf{L} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^\top = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \dot{\mathbf{F}}^e \cdot (\mathbf{F}^e)^{-1} + \mathbf{F}^e \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} \cdot (\mathbf{F}^e)^{-1} = \mathbf{L}^e + \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{L}^p \cdot (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad (16)$$

где  $\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \cdot (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}_i \mathbf{b}_i \mathbf{n}_i$ .

Введем  $\hat{\mathbf{L}}^p = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}_i \mathbf{b}_i \mathbf{n}_i$ , где  $\mathbf{b}_i, \mathbf{n}_i$  – единичные векторы в направлении вектора Бюргерса (направления сдвига) и нормали для СС в актуальной конфигурации, причем  $\mathbf{b}_i = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{b}_i^0$ ,  $\mathbf{n}_i = \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{n}_i^0$ ; согласно данной модели поворота тензор  $\mathbf{R}^e$  описывает жесткое движение, при этом пренебрегаем поворотом, связанным с упругими искажениями.

Тогда с учетом полярного разложения (14) соотношение (16) можно записать в виде

$$\mathbf{L}^e = \mathbf{L} - \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{U}^e \cdot (\mathbf{R}^e)^T \cdot \hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{R}^e \cdot (\mathbf{U}^e)^{-1} \cdot (\mathbf{R}^e)^T. \quad (17)$$

Далее, полагая упругие деформации малыми  $\mathbf{U}^e = \mathbf{E} + \mathbf{Y} + O(\mathbf{Y}^2)$ ,  $(\mathbf{U}^e)^{-1} \approx \mathbf{E} - \mathbf{Y} + O(\mathbf{Y}^2)$  ( $\mathbf{E}$  – единичный тензор), подставляя это представление в (16) и пренебрегая членом второго порядка по симметричному тензору  $\mathbf{Y}$ , получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^e &= \mathbf{L} - \mathbf{R}^e \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{Y}) \cdot (\mathbf{R}^e)^T \cdot \hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{R}^e \cdot (\mathbf{E} - \mathbf{Y}) \cdot (\mathbf{R}^e)^T, \\ \mathbf{L}^e &= \mathbf{L} - \hat{\mathbf{L}}^p - \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{Y} \cdot \mathbf{R}^{eT} \cdot \hat{\mathbf{L}}^p + \hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{Y} \cdot \mathbf{R}^{eT}. \end{aligned} \quad (18)$$

Воспользуемся (анизотропным гиперупругим) законом Гука в терминах промежуточной конфигурации (эта разгрузочная конфигурация используется в качестве отсчетной),

$$\mathbf{K}_\times = \mathbf{\Pi} : \mathbf{C}_\times, \quad (19)$$

где  $\mathbf{K}_\times$  – 2-й тензор напряжений Пиола–Кирхгоффа (с разгруженной конфигурацией в качестве отсчетной),  $\mathbf{K}_\times = \det(\mathbf{F}^e) (\mathbf{F}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{F}^e)^{-T}$ ,  $\mathbf{\Pi}$  – тензор четвертого ранга упругих свойств,  $\mathbf{C}_\times$  – тензор деформации Коши-Грина (с разгруженной конфигурацией в качестве отсчетной),

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_\times &= \frac{1}{2} \left( (\mathbf{F}^e)^T \cdot \mathbf{F}^e - \mathbf{E} \right) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{U}^e \cdot (\mathbf{R}^e)^T \cdot \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{U}^e - \mathbf{E} \right) = \frac{1}{2} \left( (\mathbf{U}^e)^2 - \mathbf{E} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left( (\mathbf{E} + \mathbf{Y}) \cdot (\mathbf{E} + \mathbf{Y}) - \mathbf{E} \right) = \frac{1}{2} (\mathbf{E} + 2\mathbf{Y} - \mathbf{E}) = \mathbf{Y}. \end{aligned} \quad (20)$$

Из (19),(20) следует

$$(\mathbf{F}^e)^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{F}^e)^{-T} = \mathbf{\Pi} : \mathbf{Y}, \quad (21)$$

и, пренебрегая квадратичными по  $\mathbf{Y}$  членами, получаем

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\Pi}^* : \left( \mathbf{R}^e \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top \right), \quad (22)$$

где  $\boldsymbol{\Pi}^* = \mathbf{R}^e \cdot \boldsymbol{\Pi} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top$ ; из (22) следует

$$\mathbf{R}^e \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top = \mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}, \quad (23)$$

где  $\mathbf{B} = (\boldsymbol{\Pi}^*)^{-1}$  – тензор четвертого ранга упругой податливости.

Таким образом, соотношение (18) принимает вид

$$\mathbf{L}^e = \mathbf{L} - \hat{\mathbf{L}}^p - (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{\mathbf{L}}^p + \hat{\mathbf{L}}^p \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}). \quad (24)$$

Рассмотрим подробнее  $\mathbf{L}^e$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^e &= \dot{\mathbf{F}}^e \cdot (\mathbf{F}^e)^{-1} = \dot{\mathbf{R}}^e \cdot \mathbf{U}^e \cdot (\mathbf{U}^e)^{-1} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top + \mathbf{R}^e \cdot \dot{\mathbf{U}}^e \cdot (\mathbf{U}^e)^{-1} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top = \\ &= \dot{\mathbf{R}}^e \cdot (\mathbf{R}^e)^\top + \mathbf{R}^e \cdot \dot{\mathbf{Y}} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top - \mathbf{R}^e \cdot \dot{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{Y} \cdot (\mathbf{R}^e)^\top. \end{aligned} \quad (25)$$

В силу симметрии  $\mathbf{Y}$  тензор  $\mathbf{R}^e \cdot \dot{\mathbf{Y}} \cdot \mathbf{R}^{e\top}$  симметричен, последний член для квазистатического нагружения мал. Тогда антисимметричная часть  $\mathbf{L}^e$  полностью определяется спином решетки  $\mathbf{W}^e = \dot{\mathbf{R}}^e \cdot \mathbf{R}^{e\top}$ .

Тензор спина решетки можно определить, альтернируя (взяв антисимметричную часть) соотношение (24):

$$\{\mathbf{L}^e\} = \{\mathbf{L}\} - \{\hat{\mathbf{L}}^p\} - \{(\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{\mathbf{L}}^p\} + \{\hat{\mathbf{L}}^p \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma})\}. \quad (26)$$

Обозначим  $\mathbf{A} = \mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}$  – симметричный тензор. Тогда

$$\{\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{L}}^p\} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{L}}^p - (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{L}}^p)^\top \right) = \frac{1}{2} \left( \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{L}}^p - (\hat{\mathbf{L}}^p)^\top \cdot \mathbf{A} \right), \quad (27)$$

$$\{\hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{A}\} = \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{A} - (\hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{A})^\top \right) = \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{L}}^p \cdot \mathbf{A} - \mathbf{A} \cdot (\hat{\mathbf{L}}^p)^\top \right), \quad (28)$$

$$\mathbf{W}^e = \mathbf{W} - \mathbf{W}^p - \mathbf{A} \cdot \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{L}}^p + (\hat{\mathbf{L}}^p)^\top \right) + \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{L}}^p + (\hat{\mathbf{L}}^p)^\top \right) \cdot \mathbf{A}. \quad (29)$$

Итак, тензор спина решетки  $\boldsymbol{\Omega}_2$  при квазистатическом нагружении определяется согласно

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

$$\text{где } \mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T), \quad \mathbf{W}^p = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}^p - (\hat{\mathbf{L}}^p)^T) = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}_i (\mathbf{b}_i \mathbf{n}_i - \mathbf{n}_i \mathbf{b}_i), \quad \mathbf{D}^p = \\ = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{L}}^p + (\hat{\mathbf{L}}^p)^T) = \sum_{i=1}^K \dot{\gamma}_i (\mathbf{b}_i \mathbf{n}_i + \mathbf{n}_i \mathbf{b}_i).$$

Соотношение (30) приводится в статье [7], но, к сожалению, выкладки приводятся не полностью и с неточностями.

Учитывая, что согласно модели стесненного поворота Тейлора спин решетки есть  $\boldsymbol{\Omega}_1 = \mathbf{W} - \mathbf{W}^p$ , получаем связь спинов решетки для моделей:

$$\boldsymbol{\Omega}_2 = \boldsymbol{\Omega}_1 - (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{\mathbf{D}}^p + \hat{\mathbf{D}}^p \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}). \quad (31)$$

Таким образом, при квазистатическом деформировании рассмотренные модели поворотов решетки в силу малости упругих деформаций  $\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}$  будут давать незначительно отличающиеся результаты.

### 3. Моделирование одноосного растяжения и осадки

Упругопластическая модель внутризеренного деформирования, описанная в разделе 1, использовалась в вычислительных экспериментах; в качестве моделируемого материала принималась чистая медь: независимые упругие модули  $c_{1111} \equiv c_1 = 168\,400$  МПа,  $c_{1122} \equiv c_2 = 121\,400$  МПа,  $c_{1212} \equiv c_3 = 75\,400$  МПа [13], начальное критическое напряжение сдвига по системам скольжения  $\tau_k^c = 15$  МПа.

Для случая одноосного растяжения (сжатия) в эксперименте (на начальных этапах – до потери однородности) грани, к которым прикладывается растягивающая нагрузка, не могут поворачиваться как жесткое целое; при предписанных кинематических условиях боковые грани также не могут поворачиваться. Это условие математически означает, что градиент деформации  $\mathbf{F}$  должен быть симметричным (вихрь нулевой,  $\mathbf{W} = \mathbf{0}$ ).

Для определенности принято, что растяжение (осадка) происходит вдоль оси  $Ox_3$  фиксированной лабораторной системы координат.

Реализация одноосного растяжения (сжатия) в рамках модели осуществляется следующим образом: предписанной является только одна компонента тензора деформации скорости  $d_{33}^{\text{ЛСК}}(t)$  (верхний индекс ЛСК относится к компонентам, определенным в базисе лабораторной системы координат), а остальные компоненты  $\mathbf{d}$  определяются, исходя из необходимости обеспечения соответствующего одноосного напряженного состояния. Постановка задачи имеет вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}(\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{m}^k) = f'(\gamma_\Sigma) \sum_{i=1}^{K_a} \dot{\gamma}^i, \quad k=1, \dots, K_a, \\ [\dot{\boldsymbol{\sigma}}]_{ij}^{\text{ЛСК}} = 0, \quad (ij) \neq (33), \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{c} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \quad \mathbf{D}^p = \sum_{k=1}^{K_a} \mathbf{m}^k \dot{\gamma}^k, \\ [\mathbf{D}]_{33}^{\text{ЛСК}} = [\mathbf{D}]_{33}^{\text{ЛСК предписанное}}, \\ \text{уравнения для определения } \boldsymbol{\Omega}. \end{array} \right. \quad (32)$$

Здесь уравнения (32)<sub>1</sub> – соотношения модели Линя, (32)<sub>2</sub> – требование удовлетворения одноосному напряженному состоянию, уравнения (32)<sub>3</sub> – определяющее соотношение (закон Гука), (32)<sub>4</sub> – кинематическое соотношение, (32)<sub>5</sub> – соотношения той или иной модели поворота. В системе (32)  $K_a + 5 + 6 + 1 + 3$  уравнений для определения неизвестных:  $K_a$  скоростей сдвигов, 6 неизвестных компонент тензора напряжений  $\boldsymbol{\sigma}$ , 6 неизвестных компонент тензора деформации скорости  $\mathbf{D}$  и 3 неизвестных компоненты тензора скорости поворота  $\boldsymbol{\Omega}$ .

Интегрирование в лабораторной системе координат сложно, поэтому была реализована схема интегрирования с позиций подвижного наблюдателя, связанного с кристаллографической системой координат, предполагающая выполнение в цикле следующих операций (до снижения разности между приращениями сдвигов на соседних итерациях до заданной величины):

1) решение с текущим значением  $O_{ih}$  системы уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} m_{ij}^s c_{ijkl} \left( \Delta \varepsilon_{lk} - \sum_{q=1}^{K_a} m_{lk}^q \Delta \gamma^q \right) = f'(\gamma_\Sigma) \sum_{q=1}^{K_a} \Delta \gamma^q, \quad s=1, \dots, K_a, \\ O_{ih} \left[ \sigma_{ij}^1 + c_{ijkl} \left( \Delta \varepsilon_{lk} - \sum_{q=1}^{K_a} m_{lk}^q \Delta \gamma^q \right) \right] O_{jg} = 0, \quad (hg) \neq (33), \\ O_{i3} \Delta \varepsilon_{im} O_{m3} = \Delta \varepsilon_{33}^{\text{ЛСК предписанное}}. \end{array} \right. \quad (33)$$

для определения неизвестных компонент тензора приращений деформации  $\Delta \varepsilon_{11}, \Delta \varepsilon_{22}, \Delta \varepsilon_{33}, \Delta \varepsilon_{12}, \Delta \varepsilon_{23}, \Delta \varepsilon_{13}$  в кристаллографической системе координат и приращений сдвигов на шаге  $\Delta \gamma^j, j=1, \dots, K_a$ , по активным системам скольжения. В (33)  $c_{ijkl}, m_{ij}^s$  – известные компоненты в кристаллографической системе координат тензора четвертого ранга упругих характеристик ГЦК-кристалла и ориентационных тензоров систем скольжения,  $\sigma_{lk}^1$  – ком-

поненты тензора напряжений в кристаллографической системе координат на начало шага. Компоненты  $O_{ih}$  тензора поворота, совмещающего кристаллографическую и лабораторные системы координат, берутся на конец шага (определяются с предыдущей итерации); на первой итерации  $O_{ih}$  совмещает кристаллографическую и лабораторные системы координат на начало шага;

2) нахождение  $O_{ih} = O_{ih}(\Delta\gamma^j)$  согласно модели поворота решетки.

Для описания ротаций монокристаллов удобно использовать обращенное движение [14]: изображение движения направления оси растяжения (сжатия) на стандартном стереографическом треугольнике, построенном в кристаллографической системе координат; иначе говоря, направление оси растяжения (сжатия) определяется с позиций подвижного наблюдателя в КСК, вращающегося вместе с кристаллической решеткой. Точка на стереографической проекции, показывающая в каждый момент деформирования направление оси растяжения (сжатия), называется изображающей точкой (оси) растяжения (ИТР).

При рассмотрении одноосного растяжения с учетом поворотов согласно модели Тейлора происходит поворот кристалла, приводящий к выходу проекции оси растяжения на границу соседних стереографических треугольников (при рассмотрении обращенного движения).

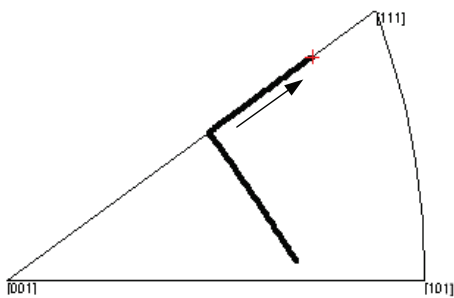


Рис. 1. Траектория ИТР для произвольно ориентированного зерна при растяжении

Затем проекция оси растяжения в случае изотропного упрочнения начинает двигаться по стороне стереографического треугольника до попадания в вершину (рис. 1). Отметим, что конкретный вид закона упрочнения при этом роли не играет, важно лишь, чтобы оно было изотропным – одинаковым для всех систем скольжения кристалла.

Для модели поворота по Тейлору аналитически, путем простого рассмотрения геометрии активных систем скольжения, достаточно легко показывается, что при одноосном растяжении должно строго происходить следующее движение оси растяжения: достижение стороны стереографического треугольника, затем – движение по стороне до достижения вершины [111], которая является аттрактором. Равенство  $\mathbf{W}^p$  нулевому тензору в вершинах стереографического треугольника вследствие равноправности активных систем скольжения, т.е. равенства скоростей сдвигов, проверяется элементарно.

Таким образом, при использовании модели поворота Тейлора при растяжении получаются результаты (рис. 2), согласующиеся с опытными дан-

ными [15]: при растяжении ось растяжения, изначально близкая к [001], стремится к направлению [001], в остальных начальных ориентировках – стремится к [111], в которой активными могут быть 6 СС.

При сжатии конечной ориентировкой (аттрактором) является [101], при которой скольжение осуществляется по четырем системам скольжения [16] (рис. 3).

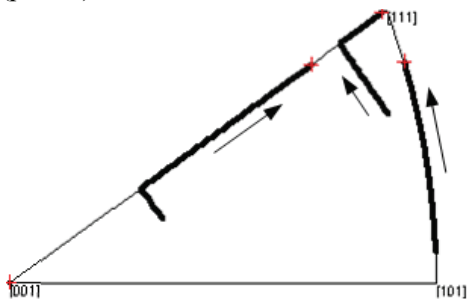


Рис. 2. Траектория ИТР для различных начальных ориентаций зерна (модель поворота Тейлора) при растяжении

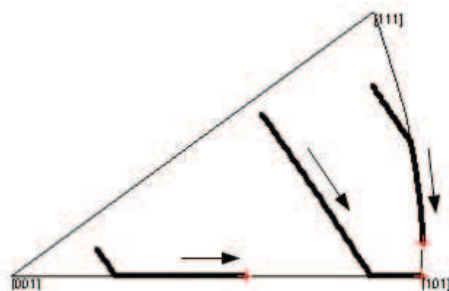


Рис. 3. Траектория проекции оси сжатия для различных начальных ориентаций зерна (модель поворота Тейлора) при сжатии

Модель материального поворота приводит к практически таким же результатам, что и модель Тейлора: для одних и тех же начальных ориентировок зерен эволюции оси растяжения и оси сжатия с использованием модели «материального» поворота практически неразличимы с приведенными на рис. 1–3. На рис. 4 приведена эволюция компонент тензора  $\mathbf{W}^P$  и антисимметричного тензора-«добавки» –  $(\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{\mathbf{D}}^P + \hat{\mathbf{D}}^P \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma})$  в кристаллографической системе координат, при расчете с данными, соответствующими расчету по модели поворота Тейлора (без упрочнения), для нагружения, отвечающего рис. 1.

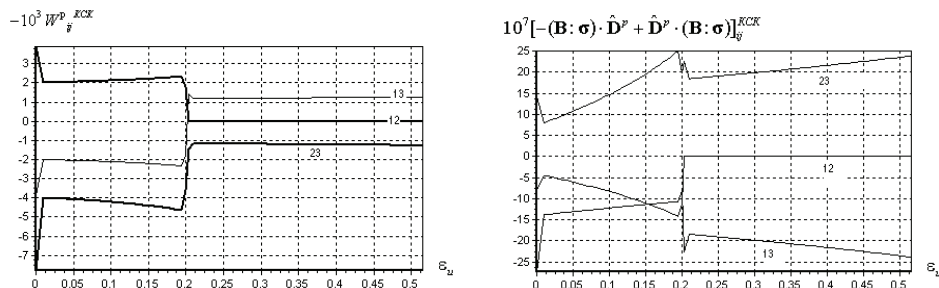


Рис. 4. Эволюция компонент тензоров  $-\mathbf{W}^P$  и  $-(\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma}) \cdot \hat{\mathbf{D}}^P + \hat{\mathbf{D}}^P \cdot (\mathbf{B} : \boldsymbol{\sigma})$  в кристаллографической системе координат (цифры определяют соответствующие компоненты тензоров)

Видно, что значение «добавки» пренебрежимо мало и логично, что модели поворотов приводят к одинаковым результатам.

### **Заключение**

В физических теориях пластичности, основанных на явном рассмотрении физических механизмов деформирования, основополагающим является описание поведения кристаллитов – зерен, в том числе ротаций решетки.

В настоящей работе рассмотрены две наиболее распространенные модели описания ротаций решеток: модель стесненного поворота Тейлора, определяющая спин решетки как разность тензора вихря и антисимметричной части тензора пластических сдвигов, и модель, связывающая поворот решетки с материальным поворотом, определяемым ортогональным тензором, сопровождающим упругую деформацию. В работе аналитически показано, что скорости поворота решетки, получаемые в этих моделях, отличаются малыми добавками.

При моделировании растяжения и осадки монокристаллов, для чего разработаны система соотношений и схема её интегрирования, с использованием обеих моделей получают незначительно отличающиеся результаты, хорошо согласующиеся с опытными данными.

При этом стоит отметить, что в обеих моделях, широко применяемых для моделирования текстурообразования в поликристаллах, никак не учитываются механизмы взаимодействия; по существу, зерна рассматриваются обособленно. В то же время физически очевидно и экспериментально подтверждено [16], что существенную роль в поворотах решетки играет несовместность скольжения дислокаций в соседних зернах. В учете данного (и других) механизма видится развитие моделей текстурообразования.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 10-08-96010-р\_урал\_a, 10-08-00156-а.

### **Библиографический список**

1. Теория образования текстур в металлах и сплавах / Я.Д. Вишняков [и др.] – М.: Наука, 1979. – 344 с.
2. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры / П.В. Трусов [и др.] // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т. 12, № 3. – С. 61–71.
3. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Двухуровневая модель упругопластического деформирования поликристаллических материалов// Механика композиционных материалов и конструкций. – 2009. –Т. 15, № 3. – С. 327–344.



4. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries / O. Diard [et al.] // *Int. J. of Plasticity*. – 2005. – Vol. 21. – P. 691–722.
5. Ашихмин В.Н., Трусов П.В. Прямое моделирование упругопластического поведения поликристаллов на мезоуровне // *Физическая мезомеханика*. – 2002. – Т.5, № 3. – С. 37–51.
6. Deformation texture prediction: from the Taylor model to the advanced Lamel model / P. Van Houtte [et al.] // *Int. J. Plasticity*. – 2005. – Vol. 21. – P. 589–624.
7. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. *Crystal plasticity // Handbook of Materials Modeling: Springer, 2005. Printed in the Netherlands*. – P. 1133–1149.
8. Линь Т.Г. *Физическая теория пластичности // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. Вып. 7. – М.: Мир. – 1976. – С. 7–68.*
9. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. *Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. М.: Наука. – 1986. – 232 с.*
10. Hutchinson J.W. *Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials // Proc.R. Soc. Lond. – 1976. – 348 (A). – P. 101–127.*
11. Anand L., Kothari M. *A computational procedure for rate-independent crystal plasticity // J. of the Mechanics and Physics of Solids. – 1996. – Vol. 44. – No. 4. – P. 525–558.*
12. Taylor G.I. *Plastic strain in metals // Journal of the Inst. Metals. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.*
13. Шермергор Т.Д. *Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.*
14. Хоникомб Р. *Пластическая деформация металлов. – М.: Мир, 1972. – 408 с.*
15. *Deformation Bands, the LEDS Theory, and Their Importance in Texture Development: Part I. Previous Evidence and New Observations / D. Kuhlmann-Wilsdorf [et al.] // Metallurgical and materials Transactions A – 1999. – Vol. 30 A. September. – P. 2491–2501.*
16. Рыбин В.В. *Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.*

Получено 12.07.2010