



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 2, 2021

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index>



DOI: 10.15593/perm.mech/2021.2.14

УДК 539.3

ЭКСТРЕМАЛЬНЫЕ КЛАСТЕРЫ ЗЕРЕН В СЛУЧАЙНЫХ МИКРОСТРУКТУРАХ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

А.А. Ташкинов, В.Е. Шавшуков

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

О СТАТЬЕ

Получена: 29 апреля 2021 г.

Принята: 15 июня 2021 г.

Опубликована: 12 июля 2021 г.

Ключевые слова:

поликристаллы, случайные микроструктуры, экстремальные мезодеформации, кластеры зерен.

АННОТАЦИЯ

Экспериментально было обнаружено, что в поликристаллических материалах при низких макронагрузках первые очаги повреждений или первых пластических сдвигов возникают в специфических кластерах из нескольких зерен, названных экстремальными кластерами. В некоторых зернах этих экстремальных кластеров локальные (мезо-) деформации и напряжения существенно выше макродеформаций и напряжений, настолько, чтобы вызвать первые локальные хрупкие повреждения или пластические скольжения. В стохастической микроструктуре поликристалла образование экстремальных кластеров является случайным и редким событием. Тем не менее эти кластеры определяют инициирование процессов разрушения и могут серьезно повлиять на надежность поликристаллических деталей машин. Экспериментально наблюдаемые кластеры состоят из нескольких (3–4) предпочтительно ориентированных соседних зерен или даже из одного большого суперзерна. Всплески локальных деформаций и напряжений обуславливаются упругим взаимодействием зерен. Можно ожидать, что в больших кластерах, состоящих из большего числа взаимодействующих зерен, могут генерироваться более высокие всплески локальных полей. Экспериментальный поиск возможных паттернов и исследование экстремальных кластеров на реальных образцах поликристаллических материалов требует больших затрат времени и ресурсов. Поэтому желателен эффективный теоретический инструмент. В работе представлен производительный вычислительный метод поиска случайно образующихся экстремальных кластеров, исследования их возможных паттернов и оценки абсолютных максимумов локальных деформаций/напряжений, которые могут быть достигнуты в этих кластерах. Метод основан на теоретико-полевом подходе к проблеме деформирования поликристаллов, дающем значительные вычислительные преимущества. Мы нашли типичные формы экстремальных кластеров (малых и больших) в четырех различных поликристаллах с зернами слабой и сильной анизотропии для случая одноосного растяжения. Во всех рассмотренных случаях экстремальные кластеры имеют форму симметричных паттернов. В кластерах сильно анизотропных зерен максимум мезодеформации в несколько раз превышает макродеформацию. В кластерах слабо анизотропных зерен концентрация локальной деформации довольно умеренная (десятки процентов).

© ПНИПУ

© Ташкинов Анатолий Александрович – д.ф.-м.н., проф., e-mail: tash@pstu.ru, [iD: 0000-0002-1852-166X](https://orcid.org/0000-0002-1852-166X).
Шавшуков Вячеслав Евгеньевич – к.ф.-м.н., доц., e-mail: shavshukov@pstu.ru, [iD: 0000-0003-3755-6507](https://orcid.org/0000-0003-3755-6507).

Anatolii A. Tashkinov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, e-mail: tash@pstu.ru, [iD: 0000-0002-1852-166X](https://orcid.org/0000-0002-1852-166X).

Viacheslav E. Shavshukov – CSc in Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, e-mail: shavshukov@pstu.ru, [iD: 0000-0003-3755-6507](https://orcid.org/0000-0003-3755-6507).



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

EXTREME CLUSTERS OF GRAINS IN RANDOM MICROSTRUCTURES OF POLYCRYSTALS

A.A. Tashkinov, V.E. Shavshukov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 29 April 2021

Accepted: 15 June 2021

Published: 12 July 2021

Keywords:

polycrystals,
random microstructures,
extreme mesostrains,
clusters of grains.

ABSTRACT

It was experimentally observed that in polycrystalline materials under low macro loading of the specimen the first sites of failure initiation take place in the specific clusters of few grains. In some grains of these extreme clusters, the local (meso-) strains and stresses are high enough to cause first damages or plastic slips. In the stochastic microstructure of polycrystals, the formation of an extreme cluster is random and rare. Nevertheless, they govern the failure process initiation and can severely affect the reliability of polycrystalline machine parts. It is time and resource consuming to search and investigate extreme clusters on the real specimens of polycrystalline materials experimentally. A theoretical tool is desirable. Here we present the powerful computational method to look for extreme clusters, to investigate their possible patterns, and to evaluate the absolute maximums of local strains/stresses that can be achieved in these clusters. The experimentally observed clusters consist of few (3-4) preferably oriented neighboring grains or even of one big supergrain. The strain and stress bursts arise due to an interaction of the grains. One can expect that in bigger clusters, larger local bursts of fields can be generated. We found the typical forms of the extreme clusters (small and big) in four different polycrystals with grains of a weak and strong anisotropy for the case of uniaxial tension. In all regarded cases, the extreme clusters have the forms of the symmetrical patterns. In big clusters of highly anisotropic grains, the maximum of mesostrain exceeds the macrostrain by several times. In clusters of weakly anisotropic grains, the local strain concentration is rather moderate (tens of percents).

© PNRPU

Введение

Поликристаллические материалы – наиболее распространенные конструкционные материалы. Они представляют собой агрегаты монокристаллических зерен. Обычно микроструктура этих материалов является стохастической: формы, размеры и кристаллографическая ориентация зерен случайны. Во многих случаях размеры зерен (десятки микрометров) намного меньше характерных размеров деталей машин, например диаметров отверстий для болтовых соединений и других концентраторов напряжений. В этих ситуациях вполне разумно рассматривать поликристаллы как однородные материалы с некоторыми эффективными свойствами и игнорировать микроструктуру. Здесь усредненные поля напряжений и деформаций являются гладкими детерминированными функциями. В других случаях важна структура зерен: дисперсионное упрочнение, скопление дислокаций, локализация очагов возникновения усталостных трещин при сверхвысокоцикловой усталости и т.д. Здесь решающее значение имеют локальные неоднородности (мезо-) деформаций и напряжений. Локальные поля – это случайные, сильно флуктуирующие функции. Предельные значения этих флуктуаций существенно влияют на некоторые критические редкие события. Например, в современных высокопрочных конструкционных сплавах, получаемых современными металлургическими методами, большие дефекты, такие как поры или инородные включения, встречаются редко. При отсутствии крупных дефектов зарождение трещин при сверхвысокоцикловой усталости (с очень

малыми амплитудами макронапряжений) происходит в объеме материала внутри микроструктурных особенностей. Экспериментально было обнаружено, что при низкой внешней нагрузке первые повреждения или пластические сдвиги происходят в предпочтительно ориентированных зернах (названных мягкими зернами) и внутри специфических скоплениях зерен (названных экстремальными микроструктурами или экстремальными кластерами) [1–5]. Мягкое зерно имеет благоприятную кристаллографическую ориентацию, которая приводит к максимальным разрешающим напряжениям сдвига в легких плоскостях скольжения. Экстремальный кластер увеличивает напряжения в мягком зерне кластера по сравнению с мягким зерном в произвольной окружающей микроструктуре. Увеличение локальных напряжений/деформаций возникает в значительной степени вследствие взаимодействия зерен [2]. Скачки локальных напряжений в кластере могут иметь решающее значение, когда макронапряжения низкие, но амплитуда скачков напряжений достаточно высока. Это могут быть случаи гиперцикловой усталости, хрупкого разрушения зерен из-за скола, возникновения ползучести при низких нагрузках и т.д. Все эти явления начинаются в одном конкретном зерне, а затем распространяются на весь материал. Для каждого явления и вида нагрузки существуют определенные кластеры соседних зерен, в которых создаются состояния с экстремальной деформацией/напряжением в некотором зерне. Взаимодействие зерен привлекает значительное экспериментальное и теоретическое внимание в материаловедении [6–11]. Есть основания полагать [2], что взаимодействие

с соседними и более удаленными зернами вносит определяющий вклад в амплитуду мезодеформаций, больший, чем случайная форма зерен. Взаимодействие зерен в значительной степени определяет структуру экстремальных кластеров. Экспериментально наблюдаемые кластеры представляют собой несколько смежных, почти одинаково ориентированных зерен [5]. Фактически они составляют одно большое зерно, иногда называемое суперзерном [12]. Вполне естественно ожидать существования других форм экстремальных кластеров, состоящих из большего количества зерен, в которых могут возникнуть очень высокие локальные мезодеформации.

Поэтому представляет интерес поиск возможных паттернов экстремальных кластеров для различных материалов и оценка максимально достижимых локальных деформаций (напряжений) в зернах при различных условиях нагружения. Современные методы рентгеновской компьютерной микротомографии с использованием синхротронного излучения, нейтронографии и другие прецизионные методы позволяют измерять деформации внутри отдельных зерен [13–17]. Таким образом, обнаружение мягких зерен в данном образце материала является доступной экспериментальной задачей. Экспериментальный поиск экстремальных кластеров намного сложнее из-за низкой вероятности случайного образования этих очень специфических кластеров. Появление экстремального кластера в образце материала – редкое явление. В настоящее время в материаловедении и инженерной практике интенсивно изучаются различные классы таких явлений, связанных с большими отклонениями от средних или равновесных значений параметров стохастических систем: термодинамические, структурные, композиционные и кинетические флуктуации, фрустрация и вырождение равновесных состояний (например, в стеклах и других аморфных материалах), неопределенности в измерениях, стохастичность в моделировании и симулировании и др. [24]. Эти явления критически влияют не только на вариативность физических свойств материалов, но и на надежность изделий, стабильность технологий, вносят стохастические переменные в процессы конструирования. Экспериментальный поиск паттернов редких экстремальных кластеров в поликристаллах потребует огромного количества образцов материала и больших затрат времени. Поэтому весьма желателен эффективный вычислительный инструмент поиска.

Гипотетически, чтобы решить эту задачу с помощью вычислений, необходимо решить серию краевых задач механики твердого тела для ряда поликристаллических тел фиксированной формы при фиксированных условиях нагружения, но с различными случайными микроструктурами, и выбрать одно тело (образец) с экстремальным кластером. Для этого требуется сгенерировать очень большое количество компьютерных моделей образцов поликристаллов, численно решить соответствующие уравнения для каждой модели и, наконец, выбрать модель с экстремальным кластером.

Такой подход прямого компьютерного моделирования широко используется в вычислительном материаловедении поликристаллов [18, 19]. Основное препятствие при поиске паттернов кластеров этим методом – это значительная вычислительная работа. Другая проблема заключается в том, что в настоящее время можно проводить численный анализ моделей образцов, содержащих всего несколько сотен зерен. В связи с этим возникает вопрос о статистической достаточности этих компьютерных моделей, поскольку даже небольшой реальный образец поликристаллического материала содержит многие миллионы зерен. В этой статье мы используем другой вычислительный подход, основанный на теоретико-полевом рассмотрении краевой задачи деформирования поликристаллического тела [20].

1. Теоретико-полевое описание упругого деформирования поликристаллического тела и алгоритм поиска экстремальных кластеров

Теоретико-полевой подход к проблеме деформирования поликристаллов основан на интегральных уравнениях для глобального тензора деформаций $\varepsilon_{ij}(\vec{r})$ в неоднородном теле. Многие авторы (большое количество ссылок на ранние работы содержится в [21]) написали такие уравнения в различных эквивалентных формах. Впервые подобное уравнение в современном виде вывел Р. де Вит применительно к проблемам теории дислокаций [22]. Для случая большого поликристаллического тела оно имеет вид

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \varepsilon_{ij}^*(\vec{r}) + \int_V d\vec{r}_1 g_{ijkl}(\vec{r} - \vec{r}_1) [C_{klmn}(\vec{r}_1) - \langle C_{klmn} \rangle] \varepsilon_{nm}(\vec{r}_1), \quad (1)$$

где $C_{ijkl}(\vec{r})$ – тензор модулей упругости поликристаллического тела; $\langle C_{ijkl} \rangle$ – осредненный по объему тела V тензор; $g_{ijkl}(\vec{r})$ – тензор Грина неограниченной однородной среды с осредненным тензором модулей, определяемый через вторые производные функции Грина $G_{ij}(\vec{r})$ равенствами $g_{ijkl} \equiv \frac{1}{2}(G_{ik,jl} + G_{jk,il})$, а $\varepsilon_{ij}^*(\vec{r})$ есть решение краевой задачи для тела с осредненным тензором $\langle C_{ijkl} \rangle$, которое считается известным. Здесь и далее индексы после запятой обозначают дифференцирование по соответствующей координате. Предполагается суммирование по повторяющимся индексам.

Для нетекстурированного поликристаллического тела осредненный тензор модулей упругости изотропен и имеет вид

$$\langle C_{ijkl} \rangle = 3\langle K \rangle \cdot V_{ijkl} + 2\langle \mu \rangle \cdot D_{ijkl}, \quad (2)$$

где $\langle K \rangle$ и $\langle \mu \rangle$ – осредненный объемный модуль и модуль сдвига; V_{ijkl} и D_{ijkl} – шаровая и девiatorные части единичного симметричного тензора 4-го ранга. Тензор Грина изотропной среды известен:

$$g_{ijkl}(\vec{r}) = -\frac{1}{3\langle\mu\rangle} \left[(1-\chi)V_{ijkl} + (1-\frac{2}{5}\chi)D_{ijkl} \right] \delta(\vec{r}) + \frac{f_{ijkl}(\vec{r})}{\langle\mu\rangle|\vec{r}|^3}, \quad (3)$$

где $\chi = \frac{3\langle K \rangle + \langle \mu \rangle}{3\langle K \rangle + 4\langle \mu \rangle}$, а функция $f_{ijkl}(\vec{r})$ зависит только от углов

$$f_{ijkl}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi} \left[3(n_i n_j \delta_{jk} + n_j n_i \delta_{ik}) - 2I_{ijkl} + \chi(I_{ijkl} + I_{ikjl} + I_{ijlk}) - 3\chi(n_i n_j \delta_{kl} + n_i n_k \delta_{jl} + n_i n_l \delta_{jk} + n_j n_k \delta_{il} + n_j n_l \delta_{ik} + n_k n_l \delta_{ij} - 5n_i n_j n_k n_l) \right], \quad (4)$$

$n_i = \frac{x_i}{|\vec{r}|}$ есть направляющие косинусы радиус-вектора \vec{r} .

Использование в уравнении (1) решения для осредненного тела $\varepsilon_{ij}^*(\vec{r})$ не всегда удобно, в частности для целей настоящей статьи. Ниже будет показано, что в качестве $\varepsilon_{ij}^*(\vec{r})$ можно взять решение для любого другого тела сравнения (по терминологии [25]). Приведем вывод интегрального уравнения для тензора деформаций в этом случае, который отличается от классического вывода уравнения (1).

Ограничимся однофазными поликристаллами без текстуры. Кристаллографические оси кристаллитов ориентированы в пространстве случайным образом и для разных кристаллитов не коррелируют друг с другом. Поликристаллический агрегат представляет собой область объема V с внешней границей S , состоящей из подобластей (кристаллитов) с объемами ω_ξ и границами S_ξ . Объем V равен сумме $V = \sum_{\xi=1}^N \omega_\xi$, где N - полное количество кристаллитов в теле. Все кристаллиты прочно связаны на своих границах, поэтому декартовы проекции вектора смещений являются непрерывными функциями координат. Тензор модулей упругости поликристаллической среды

$$C_{ijmn}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_\xi(\vec{r}) C_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r}), \quad (5)$$

где $\lambda_\xi(\vec{r})$ – индикаторная функция ξ -го кристаллита (равна единице в ω_ξ и нулю в противном случае); $C_{ijmn}^{(\xi)}(\vec{r})$ – тензор модулей упругости ξ -го кристаллита в глобальной системе координат. Тензор $C_{ijmn}(\vec{r})$ постоянен в пределах любой области ω_ξ и скачкообразно изменяется при пересечении границ S_ξ из-за изменения ориентации кристаллической решетки кристаллита в пространстве.

Компоненты вектора перемещений удовлетворяют дифференциальным уравнениям

$$C_{ijkl}(\vec{r})u_{k,jl}(\vec{r}) + f_i(\vec{r}) = 0, \quad (6)$$

где $f_i(\vec{r})$ – объемная сила. Граничные условия примем в кинематическом виде

$$u_i(\vec{r})|_{\vec{r} \in S} = \psi_i(\vec{r}), \quad (7)$$

где $\psi_i(\vec{r})$ – гладкая функция координат.

Микроструктура поликристаллического твердого тела задается тензорной функцией модулей упругости $C_{ijmn}(\vec{r})$. Представим глобальный тензор модулей упругости в виде суммы постоянного изотропного тензора тела сравнения C_{ijkl}^* и флуктуирующей части

$$C_{ijkl}(\vec{r}) = C_{ijkl}^* + C'_{ijkl}(\vec{r}). \quad (8)$$

Тензор модулей упругости тела сравнения равен

$$C_{ijkl}^* = 3K^* \cdot V_{ijkl} + 2\mu^* \cdot D_{ijkl},$$

где K^* и μ^* – объемный модуль и модуль сдвига этого тела.

Рассмотрим две краевые задачи. Первая задача является исходной – для перемещений в неоднородном теле (6), которое после разложения глобального тензора (8) принимает вид

$$C_{ijkl}^* u_{k,jl}(\vec{r}) + [C'_{ijkl} u_{k,l}(\vec{r})]_{,j} + f_i(\vec{r}) = 0. \quad (9)$$

Вторая задача ставится для вектора перемещений $u_i^*(\vec{r})$ в изотропном теле сравнения (такой же формы и размеров, как исходное тело)

$$C_{ijkl}^* u_{k,jl}^*(\vec{r}) + f_i(\vec{r}) = 0 \quad (10)$$

и с граничными условиями как в (7)

$$u_i^*(\vec{r})|_{\vec{r} \in S} = \psi_i(\vec{r}). \quad (11)$$

Введем функцию Грина $G_{km}^*(\vec{r})$ для тела сравнения посредством уравнения

$$C_{ijkl}^* G_{km,jl}^*(\vec{r}) + \delta_{im} \delta(\vec{r}) = 0 \quad (12)$$

с граничными условиями на границе тела

$$G_{km}^*(\vec{r})|_S = 0. \quad (13)$$

Нахождение функции Грина для тела конечных размеров – трудная задача. Аналитические выражения известны лишь для частных случаев. Однако существуют численные методы нахождения таких функций Грина [26, 27].

Используя теорему Грина, преобразуем уравнение (10) в интегро-дифференциальное:

$$u_m^*(\vec{r}) = \int_V d^3\vec{r}' f_i(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') + \oint_S dS'_j C'_{ijkl} [u_{k,l}^*(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') - u_i^*(\vec{r}') G_{km,l}^*(\vec{r} - \vec{r}')]. \quad (14)$$

Аналогичное преобразование сделаем для уравнения (9)

$$u_m(\vec{r}) = \int_V d^3\vec{r}' \left[C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right]_j G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') + \int_V d^3\vec{r}' f_i(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') + \oint_S dS'_j C'_{ijkl} \left[u_{k,l}(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') - u_i(\vec{r}') G_{km,l}^*(\vec{r} - \vec{r}') \right]. \quad (15)$$

В первом интеграле в (15) производим интегрирование по частям

$$\begin{aligned} & \int_V d^3\vec{r}' \left[C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right]_j G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') = \\ & = \oint_S dS'_j C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') - \\ & - \int_V d^3\vec{r}' C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') G_{im,j'}^*(\vec{r} - \vec{r}'). \end{aligned} \quad (16)$$

Дифференцирование функции Грина в последнем объемном интеграле (16) производится по координате \vec{r}' , что отмечено штрихом у индекса после запятой j' . В силу граничных условий (13), для функции Грина поверхностный интеграл в (16) обращается в ноль, и интегро-дифференциальное уравнение (15) упрощается:

$$\begin{aligned} u_m(\vec{r}) = & \int_V d^3\vec{r}' f_i(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') - \\ & - \int_V d^3\vec{r}' C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') G_{im,j'}^*(\vec{r} - \vec{r}') + \\ & + \oint_S dS'_j C'_{ijkl} \left[u_{k,l}(\vec{r}') G_{im}^*(\vec{r} - \vec{r}') - u_i(\vec{r}') G_{km,l}^*(\vec{r} - \vec{r}') \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

В силу граничных условий (7) и (11) для векторов перемещений обеих задач поверхностные интегралы в (14) и (17) совпадают. Вычитая из уравнения (17) уравнение (14), получаем

$$u_m(\vec{r}) = u_m^*(\vec{r}) - \int_V d^3\vec{r}' C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') G_{im,j'}^*(\vec{r} - \vec{r}') . \quad (18)$$

Дифференцируя (18) по x_n и замечая, что $G_{im,j'}^*(\vec{r} - \vec{r}') = -G_{im,j}^*(\vec{r} - \vec{r}')$, получаем интегральное уравнение для градиента деформаций

$$u_{m,n}(\vec{r}) = u_{m,n}^*(\vec{r}) + \int_V d^3\vec{r}' C'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') G_{im,jn}^*(\vec{r} - \vec{r}') . \quad (19)$$

Симметризацией по индексам m и n получаем искомого интегральное уравнение для глобального тензора деформаций в поликристаллическом теле

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \varepsilon_{ij}^*(\vec{r}) + \int_V d\vec{r}'_1 g_{ijkl}^*(\vec{r} - \vec{r}'_1) \left[C_{klmn}(\vec{r}_1) - C_{klmn}^* \right] \varepsilon_{mn}(\vec{r}_1), \quad (20)$$

где $g_{ijkl}^* \equiv \frac{1}{2} (G_{ik,jl}^* + G_{jk,il}^*)$ есть тензор Грина тела сравнения.

Внешне уравнение (20) совпадает с уравнением (1), если в последнем формально заменить тензор Грина

осредненной среды g_{ijkl} на тензор Грина тела сравнения g_{ijkl}^* , а тензор $\langle C_{ijkl} \rangle$ – на тензор C_{ijkl}^* . Для вычисления тензора деформаций $\varepsilon_{ij}(\vec{r})$ по уравнению (20) для большого поликристаллического тела в точках вдали от границ можно использовать в качестве тензора Грина тела сравнения тензор Грина неограниченной среды с модулями упругости K^* и μ^* . Тензор Грина будет определяться выражениями (3) и (4) с заменой осредненных модулей на модули тела сравнения. В качестве последних в настоящей работе будут использоваться макроскопические эффективные модули, определяемые экспериментально.

Решение континуального уравнения (20) осуществляется так же, как и уравнения (1) – путем дискретизации и трансформации интегрального уравнения в систему линейных алгебраических уравнений [23]. Для этого сначала глобальный тензор $\varepsilon_{ij}(\vec{r})$ разлагается на сумму локальных деформаций в зернах $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r})$:

$$\varepsilon_{ij}(\vec{r}) = \sum_{\xi=1}^N \lambda_{\xi}(\vec{r}) \varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}), \quad (21)$$

в результате чего уравнение (20) распадается на систему уравнений для локальных полей

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r}_{\xi}) = & \varepsilon_{ij}^*(\vec{r}_{\xi}) + \int_{\omega_{\xi}} d\vec{r}'_{\xi} g_{ijkl}(\vec{r}_{\xi} - \vec{r}'_{\xi}) C'_{klmn}(\vec{r}'_{\xi}) \varepsilon_{mn}^{(\xi)}(\vec{r}'_{\xi}) + \\ & + \sum_{\eta \neq \xi} \int_{\omega_{\eta}} d\vec{r}'_{\eta} g_{ijkl}(\vec{r}_{\xi} - \vec{r}'_{\eta}) C'_{klmn}(\vec{r}'_{\eta}) \varepsilon_{mn}^{(\eta)}(\vec{r}'_{\eta}). \end{aligned} \quad (22)$$

Для приближенного решения (22) применяется кусочно-постоянная аппроксимация внутризеренных полей $\varepsilon_{ij}^{(\xi)}(\vec{r})$. Каждое зерно разбивается на большое число малых субзерен, а внутризеренные поля представляются в виде суперпозиции субзеренных полей $\varepsilon_{mn}^{(a)(\xi)}$ (латинский индекс "a" нумерует субзерна внутри ξ -го зерна), каждое из которых полагается постоянным внутри субзерна. В итоге система интегральных уравнений (22) трансформируется в систему линейных алгебраических уравнений для сублокальных полей (детали преобразований приведены в [23]):

$$\begin{aligned} \left[I_{ijmn} - B_{ijmn}^{(aa)(\xi)} \right] \varepsilon_{mn}^{(a)(\xi)} = & \varepsilon_{ij}^* + \sum_{\eta \neq \xi} \sum_{e=1}^n B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} \varepsilon_{mn}^{(e)(\eta)}, \quad (23) \\ \xi, \eta = & 1, 2, \dots, N; \quad a, e = 1, 2, \dots, n, \end{aligned}$$

где коэффициенты взаимодействия субзерен

$$\begin{aligned} B_{ijmn}^{(ab)(\xi)} & \equiv \int_{\omega_b} d\vec{r}'_b g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_b) \cdot C_{klmn}^{(a)(\xi)}; \\ B_{ijmn}^{(ae)(\eta)} & \equiv \int_{\omega_e} d\vec{r}'_e g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_e) \cdot C_{klmn}^{(a)(\eta)} \end{aligned} \quad (24)$$

описывают взаимодействие субзерен в одном зерне и в разных зернах соответственно, I_{ijmn} – единичный

тензор, n – число субзерен в каждом η -м зерне. Система (23) решается методом теории возмущений по межсубзеренному взаимодействию [28], представляемому всеми членами под знаками двойной суммы (по зернам и субзернам). Решение для каждого субзерна представляется в виде суммы поправок различных порядков

$$\varepsilon_{ij}^{(a)(\xi,\eta)} = \varepsilon_{ij}^{(0)(a)(\xi,\eta)} + \varepsilon_{ij}^{(1)(a)(\xi,\eta)} + \dots \quad (25)$$

В первом порядке по взаимодействию для поправок нулевого и первого порядка остается система уравнений

$$\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\xi)} = \varepsilon_{ij}^*,$$

$$\varepsilon_{ij}^{(1)(a)(\xi)} - B_{ijkl}^{(aa)(\xi)} \varepsilon_{mn}^{(1)(a)(\xi)} = \sum_{\eta \neq \xi} \tilde{B}_{ijkl}^{(an)} \varepsilon_{kl}^{(0)(\eta)}, \quad (26)$$

где новый коэффициент $\tilde{B}_{ijkl}^{(an)} \equiv \int_{\omega_\eta} d\vec{r}'_\eta g_{ijkl}(\vec{r}_a - \vec{r}'_\eta) \cdot C_{klmn}^{a'(\eta)}$

описывает взаимодействие a -го субзерна в ξ -м зерне с η -м зерном в целом. В упомянутой выше статье показано, что в зернах в виде выпуклых многогранников поправки нулевого порядка почти постоянны во внутренних частях зерен (до 90 % по объему). В частности, в сферическом зерне поправки нулевого порядка для каждого зерна постоянны и совпадают с решением Эшелби для сферического включения.

Важным следствием структуры системы (26) является то, что вклад в деформацию в каком-либо субзерне от взаимодействий с другими субзернами аддитивен. Аддитивность позволяет вычислять вклад от взаимодействий с другими зернами отдельно. Это означает, что достаточно решить множество редуцированных систем (26) только с одним членом в сумме в правой части, т.е. для каждого взаимодействующего зерна по отдельности, а затем сложить все полученные «парные» вклады взаимодействий. Свойство аддитивности взаимодействий является большим вычислительным преимуществом теоретико-полевого подхода при поиске паттернов экстремальных кластеров.

Традиционный вычислительный метод поиска экстремальных кластеров состоит в следующем. Необходимо сгенерировать большое количество компьютерных моделей поликристаллического тела с различными микроструктурами. Каждая модель должна содержать большое число зерен, чтобы быть статистически адекватной реальному макроскопическому телу, состоящему из многих миллионов зерен. Затем для каждой модели решить краевую задачу деформирования и выбрать модель, в которой в каком-либо зерне интересующая компонента деформации (или любая комбинация компонент тензора деформаций) имеет максимальное значение. Окружение этого зерна в выбранной модели и будет экстремальным кластером. Огромное число зерен в реальном образце поликристаллического материала и бесконечное количество возможных случайных микроструктур делает этот путь нереализуемым.

Аддитивность теоретико-полевого подхода дает альтернативный путь поиска, кардинально сокращающий требуемый объем вычислительной работы. Предлагаемый алгоритм состоит в следующем.

Фиксируется одно (ξ -е) зерно, включая его форму, размеры и ориентацию кристаллографических осей, и какое-либо (a -е) субзерно в нем. Затем для заданных граничных условий решаем первое уравнение в (26) для поправки нулевого порядка $\varepsilon_{ij}^{(0)(\xi)}$. Это решение не зависит от всех других зерен в поликристалле. Далее выбираем какое-либо соседнее η -е зерно и генерируем большой массив случайных конфигураций этого зерна. Для каждой конфигурации этого зерна получаем решение нулевого порядка. Эти решения не зависят друг от друга. После этого уравнения второй строки в редуцированной системе (26) для поправок первого порядка в a -м субзерне ξ -зерна решаются для каждой конфигурации η -зерна, но только с одним членом в сумме правой части уравнения. Максимальное значение из массива полученных решений определяет экстремальную конфигурацию η -зерна и его экстремальный вклад в деформацию ξ -зерна. Такая процедура проводится для всех остальных соседних и удаленных зерен тела. Сумма этих поправок дает решение для экстремальной деформации в данном субзерне ξ -го зерна. Это максимально возможная деформация в выбранной точке ξ -го зерна. Совокупность всех окружающих η -х зерен в экстремальных конфигурациях составляет экстремальный кластер для заданных условий. Эту процедуру легко провести для очень большого количества зерен, вплоть до всего поликристаллического образца с миллионами зерен.

Флуктуации механических полей в поликристаллах обусловлены случайными формами зерен, случайными ориентациями кристаллографических осей зерен и взаимодействием зерен. Определенные сочетания этих факторов могут приводить к маргинальным всплескам деформаций в некоторых зернах. В настоящей работе мы ограничимся влиянием последних двух стохастических факторов. Некоторые исследователи [2 и др.] называют взаимодействие зерен главным фактором амплитуд флуктуаций и формирования экстремальных кластеров.

2. Паттерны экстремальных кластеров при одноосном растяжении

Применим описанный алгоритм поиска экстремальных кластеров к четырем различным поликристаллам с разной упругой симметрией и степенью анизотропии зерен. Вычислительные эксперименты проведем на модельном поликристаллическом теле с зернами кубической формы. Тело предполагается достаточно большим, так что к нему применим изложенный выше математический формализм. На рис. 1 показано поперечное сечение центральной части модельного поликристалла вместе с осями глобальной системы координат. Зате-

ненное зерно в центре есть ξ -е зерно, в котором будет разыскиваться максимально достижимая деформация, обусловленная взаимодействием с окружающими зернами и ориентаций кристаллографических осей этих зерен.

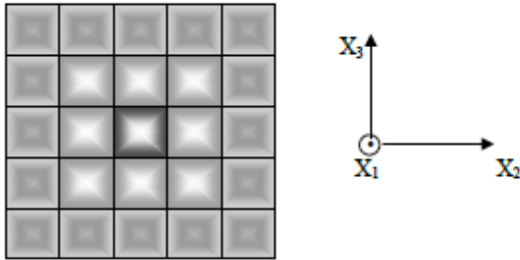


Рис. 1. Модельный поликристалл

Fig. 1. A model polycrystal

Экстремальные кластеры могут генерировать максимум любого компонента тензора деформации (или любых комбинаций компонентов деформации) в интересующем зерне. Мы рассмотрим простое одноосное растяжение вдоль координатной оси x_3 и будем искать максимальную деформацию растяжения $\epsilon_{33}^{(a)(\xi)} = \epsilon_{33}^{(0)(\xi)} + \epsilon_{33}^{(1)(a)(\xi)}$ в центре центрального зерна. Случайность микроструктуры в этой модели состоит из случайных ориентаций кристаллографических осей зерен.

Зафиксируем кристаллографические оси центрального зерна параллельно осям координат и найдем ориентации кристаллографических осей окружающих зерен, при которых эти зерна вносят максимальную добавку к деформации в центральном зерне при фиксированной нагрузке.

Интенсивность упругого взаимодействия, характеризуемая коэффициентами $\tilde{B}_{ijmn}^{(am)}$, уменьшается с увеличением расстояния между зернами. Для удаленных зерен оно падает обратно пропорционально расстоянию в кубе. Для соседних зерен падение намного медленнее [23]. Таким образом, взаимодействие упругих зерен является дальнедействующим. Все зерна удобно разделить на группы по расстояниям от интересующего зерна: первые соседи (на расстоянии одного размера зерна), вторые соседи (на расстоянии двух зерен), третьи соседи и т.д. Первая группа содержит 26 зерен, вторая группа – 98 зерен, третья – 218 зерен и т. д. Зерна каждой группы на рис. 1 окрашены одинаково. Континуальные распределения случайных ориентаций кристаллографических осей зерен мы заменили на 10^6 случайных дискретных кристаллографических ориентаций для каждого зерна. Тензор модулей упругости зерна в глобальной системе координат $C_{ijkl}^{(\xi)}$ связан с тензором в кристаллографической системе C_{ijkl}^0 обычными формулами преобразования

$$C_{ijmn}^{(\xi)} = \alpha_{ip}^{(\xi)}(\vec{r}) \alpha_{jq}^{(\xi)}(\vec{r}) \alpha_{mr}^{(\xi)}(\vec{r}) \alpha_{ns}^{(\xi)}(\vec{r}) C_{pqrs}^0,$$

где $\alpha_{ip}^{(\xi)}(\vec{r})$ – направляющие косинусы осей глобальной системы координат относительно кристаллографической системы координат ξ -го кристаллита. Направляющие косинусы задаются случайными углами Эйлера. Равновероятность дискретных ориентаций обеспечивается специальной плотностью распределением углов Эйлера [29] для нетекстурированного поликристалла. Все необходимые вычисления включают численное интегрирование для коэффициентов B_{ijmn} и решение систем линейных алгебраических уравнений. Обе операции – это очень быстро выполняемые компьютерные процедуры.

2.1. Экстремальные кластеры в материалах с кубической упругой анизотропией зерен

Рассмотрим два поликристалла кубической сингонии со слабой и сильной анизотропией зерен – молибден и медь.

Для молибдена упругие постоянные монокристалла зерна в кристаллографической системе координат, использованные в вычислениях: $C_{1111}^0 = 469,6$ ГПа, $C_{1122}^0 = 167,6$ ГПа, $C_{2323}^0 = 106,8$ ГПа, фактор анизотропии Зинера 0,707. Эти и другие числовые данные по механическим свойствам, использованные в расчетах, взяты из [30, 31]. Макроскопические упругие постоянные поликристаллического молибдена: модуль Юнга $E = 328,0$ ГПа, модуль сдвига $\mu = 125,2$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0,31$. Эти значения используются в формуле (3) для тензора Грина вместо осредненных макроскопических модулей $\langle K \rangle$ и $\langle \mu \rangle$. Поликристалл молибдена подвергнут одноосному растяжению с макронапряжением $\sigma_{33}^* = 98,4$ МПа (остальные $\sigma_{11}^* = \sigma_{22}^* = 0$), что соответствует однородной макродеформации $\epsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$, $\epsilon_{11}^* = \epsilon_{22}^* = -0,93 \cdot 10^{-4}$. Для данного случая и во всех ниже рассмотренных значение одноосного макронапряжения выбрано так, чтобы продольная макродеформация была одной и той же для всех примеров. В интегральной форме краевой задачи деформирования эти значения макродеформаций входят в качестве параметров в исходное уравнение (1) и его трансформированную алгебраическую форму (23).

В табл. 1 представлены вычисленные вклады трех групп соседних зерен: 26 ближайших зерен-соседей, 98 вторых по удалению зерен и 218 третьих по удалению зерен с экстремальной ориентацией каждого из этих 342 взаимодействующих с центральным зерном зерен. Приведены как максимальные положительные вклады, так и минимальные отрицательные вклады. Первые обуславливают абсолютный максимум искомой деформации, вторые – абсолютный минимум на ансамбле всех возможных микроструктур. Полная деформация в центральном зерне равна сумме вкладов от всех трех групп

зерен $\epsilon_{33}^{(\xi)} = \epsilon_{33}^{(0)(\xi)} + \epsilon_{33}^{(1)(\xi)}|_{26} + \epsilon_{33}^{(1)(\xi)}|_{98} + \epsilon_{33}^{(1)(\xi)}|_{218}$. Вычисления для следующих по удалению групп не вызывают затруднений и здесь не приводятся. Данные табл. 1 соответствуют двум локальным экстремальным микроструктурам из всех зерен-соседей, максимизирующим и минимизирующим искомую деформацию в центральном зерне. Для промежуточных (неэкстремальных) ориентаций зерен каждой группы аддитивные поправки распределены между маргинальными значениями, показанными в табл. 1. Среднее значение для поправок на ансамбле всех возможных промежуточных ориентаций зерен каждой группы близко к нулю.

Таблица 1

Молибден: экстремальные деформации и вклады различных групп зерен

Table 1

Molybdenum. Extreme strains and contributions of different groups of grains

Макродеформация $\epsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$		Вклады групп зерен			Полная деформация $\epsilon_{33}^{(\xi)}$	
		$\epsilon_{33}^{(0)(\xi)}$	$\epsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{26}$	$\epsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{98}$		$\epsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{218}$
Центр ξ -го зерна	максимум	2,7585·10 ⁻⁴	0,5949·10 ⁻⁴	0,3969·10 ⁻⁴	0,2687·10 ⁻⁴	4,0190·10 ⁻⁴
	минимум		-0,5092·10 ⁻⁴	0,3776·10 ⁻⁴	-0,2299·10 ⁻⁴	1,6418·10 ⁻⁴

Поправки от взаимодействия с удаленными группами зерен убывают довольно медленно. Наши расчеты показали, что только для расстояния 6–7 диаметров зерен вклад удаленной группы падает до 1% поправки нулевого порядка. Однако экстремальные ориентации удаленных групп зерен представляют исключительно теоретический интерес, поскольку одновременная специфическая ориентация большого количества зерен имеет очень низкую вероятность. Интерес могут представлять отдельные удаленные зерна в специфических

позициях относительно центрального зерна, дающие намного (иногда на порядок и более) больший вклад, чем зерна такого же удаления в других позициях. Поэтому здесь мы ограничимся анализом экстремальных кластеров, обусловленных взаимодействием с первым (ближайшим), вторым и третьим по удалению окружением соседних зерен. Данные табл. 1 и таблиц, приведенных ниже, иллюстрируют дальнедействующий характер упругого взаимодействия.

Максимальная деформация в центральном зерне $\epsilon_{33}^{(\xi)} = 4,0190 \cdot 10^{-4}$ превосходит макродеформацию $\epsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$ на 43%. Экстремальные поправки от взаимодействия соответствуют весьма специфическим ориентациям каждого из взаимодействующих зерен в кластере. Ориентации задаются углами Эйлера кристаллографических осей, которые фиксируются разработанным алгоритмом.

На рис. 2 схематично показаны ориентации кристаллографических осей зерен в двух экстремальных кластерах для вертикального сечения образца, показанного на рис. 1. Чтобы сделать этот и рисунки ниже менее громоздкими, мы показали только первые и вторые соседние зерна.

На рис. 2, а изображен кластер, максимизирующий деформацию в центральном зерне, на рис. 2, б – кластер, минимизирующий деформацию. Маленькие значки внутри зерен схематично визуализируют ориентацию кристаллографических осей каждого зерна в кластере с помощью проекций воображаемого куба (показанного в центре рис. 2), жестко связанного с кристаллографическими осями зерен (ортогональными его граням). Вращение этого куба эквивалентно вращению кристаллографических осей зерна. Вычислительный алгоритм дает точные ориентации по углам Эйлера. Кристаллографические оси зерен в обоих крайних кластерах имеют весьма симметричную ориентацию относительно центра кластера. Зерна образуют характерные паттерны микроструктуры.

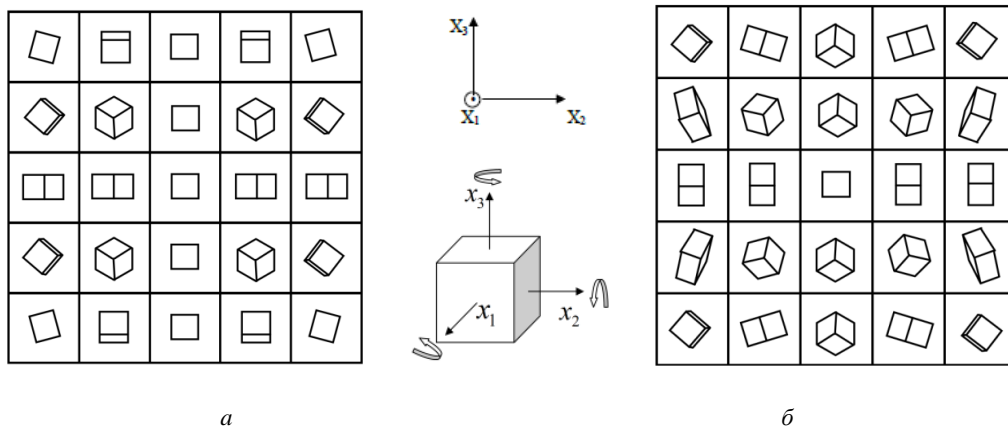


Рис. 2. Экстремальные кластеры в молибдене: а – максимизирующий; б – минимизирующий

Fig. 2. Extreme clusters for molybdenum: a – maximizing; b – minimizing

Обратимся к максимизирующему кластеру. Вычисления показали, что положительные вклады от различных одинаково удаленных зерен существенно (более чем на порядок) различаются. Например, только два зерна из первой группы соседей – одно чуть выше и одно чуть ниже центрального зерна – дают одну треть общего вклада 26 ближайших зерен. Эти два зерна и центральное зерно одинаково ориентированы. Фактически они составляют одно суперзерно тройной длины. В целом взаимодействие зерен приводит к умеренной концентрации деформации в молибдене. Даже довольно большой экстремальный кластер из 125 зерен, изображенный на рис. 2, а, дает увеличение макродеформации всего на 25 %.

В качестве другого примера рассмотрим поликристалл меди. Монокристаллы зерен меди сильно анизотропны. Их упругие постоянные $C_{1111}^0 = 168,3$ ГПа, $C_{1122}^0 = 122,1$ ГПа, $C_{2323}^0 = 75,7$ ГПа, фактор анизотропии Зинера 3,277. Макроскопические упругие модули поликристаллической меди равны модуль Юнга $E = 122,0$ ГПа, модуль сдвига $\mu = 45,1$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0,35$. Как и в предыдущем примере образец поликристаллической меди подвергнут одноос-

ному растяжению $\sigma_{33}^* = 36,6$ МПа, что соответствует однородной макродеформации $\varepsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$, $\varepsilon_{11}^* = \varepsilon_{22}^* = -1,05 \cdot 10^{-4}$.

В табл. 2 приведены вычисленные вклады трех групп соседних зерен в экстремальных конфигурациях всех 342 взаимодействующих зерен, соответствующих максимальному положительному и минимальному отрицательному вкладам.

В максимизирующем экстремальном кластере максимальная деформация растяжения в центральном зерне превышает макродеформацию в 3,3 раза. В минимизирующем экстремальном кластере центральное зерно испытывает значительное сжатие в направлении внешней нагрузки, хотя макродеформация является растягивающей положительной. Таким образом, в поликристалле меди с сильно анизотропными зёрнами состояние отдельных зерен может качественно отличаться от макросостояния тела. Роль межзеренного взаимодействия в меди намного выше, чем в молибдене.

На рис. 3 показаны ориентации кристаллографических осей зерен в двух экстремальных кластерах для вертикального сечения образца.

Таблица 2

Медь: экстремальные деформации и вклады различных групп зерен

Table 2

Copper. Extreme strains and contributions of different groups of grains

Макродеформация $\varepsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$		Вклады групп зерен				Полная деформация $\varepsilon_{33}^{(\xi)}$
		$\varepsilon_{33}^{(0)(\xi)}$	$\varepsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{26}$	$\varepsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{98}$	$\varepsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{218}$	
Центр ξ -го зерна	максимум	$3,9961 \cdot 10^{-4}$	$2,6949 \cdot 10^{-4}$	$1,9967 \cdot 10^{-4}$	$1,2063 \cdot 10^{-4}$	$9,8940 \cdot 10^{-4}$
	минимум		$-2,9653 \cdot 10^{-4}$	$-2,0143 \cdot 10^{-4}$	$-1,2169 \cdot 10^{-4}$	$-2,2004 \cdot 10^{-4}$ сжатие

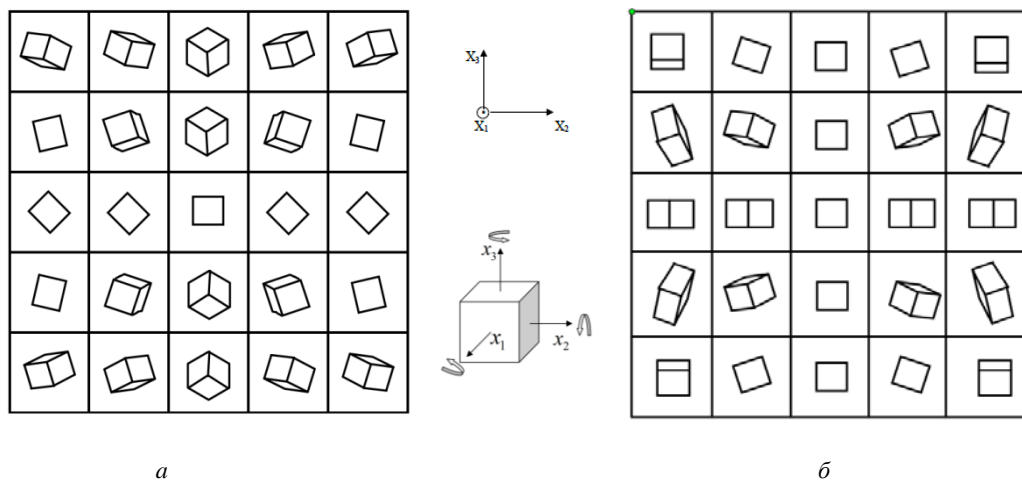


Рис. 3. Экстремальные кластеры в меди: а – максимизирующий, б – минимизирующий

Fig. 3. Extreme clusters in copper: a – maximizing, b – minimizing

В случае меди в максимизирующем кластере нельзя выделить суперзерно. Экстремальный кластер имеет более сложную структуру. Как и в поликристалле молибдена вклады разных равноудаленных зерен сильно различаются по величине. Вклады двух ближайших зерен-соседей – одного над и второго под центральным зерном – составляют 18,1 % от общего вклада взаимодействия со всеми 26 ближайшими зернами. Хотя это в процентном выражении и меньше, чем в молибдене, но в таком трех зеренном кластере в центральном зерне генерируется деформация $\varepsilon_{33}^{(\xi)} = \varepsilon_{33}^{(0)(\xi)} + \varepsilon_{33}^{(1)(\xi)} \Big|_{\text{two nearest}} = 4,4839 \cdot 10^{-4}$, что превосходит макродеформацию $\varepsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$ на 49,5 %. Даже такой малый кластер дает весьма существенную концентрацию деформаций. В то же время вероятность спонтанного образования такого маленького кластера намного выше, чем больших кластеров. С другой стороны, в сильно анизотропной меди влияние удаленных зерен намного сильнее, чем в слабо анизотропном молибдене. Большие экстремальные кластеры в меди генерируют очень большую концентрацию деформаций.

2.2. Экстремальные кластеры в материалах с гексагональной упругой анизотропией зерен

Рассмотрим два поликристалла с гексагональной упругой симметрией и слабой и сильной анизотропией зерен – титан и цинк. Для гексагональных кристаллов степень анизотропии принято характеризовать отношением периодов кристаллической решетки вдоль гексагональной оси и в перпендикулярном направлении c/a . Параметр Зинера может быть рассчитан и для этих кристаллов, но здесь он менее информативен.

Монокристалл титана имеет следующие значения компонент тензора модулей упругости в кристаллографической системе координат: $C_{1111}^0 = 162,4$ ГПа, $C_{3333} = 180,7$ ГПа, $C_{1122}^0 = 92,0$ ГПа, $C_{1133}^0 = 69,0$ ГПа, $C_{2323}^0 = 46,7$ ГПа. Отношение периодов кристалличе-

ской решетки $c/a = 1,587$. Макроскопические упругие постоянные поликристаллического титана: модуль Юнга $E = 108,8$ ГПа, модуль сдвига $\mu = 40,6$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0,34$. Поликристалл титана подвергнут одноосному растяжению $\sigma_{33}^* = 32,64$ МПа, соответствующему макродеформациям $\varepsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$, $\varepsilon_{11}^* = \varepsilon_{22}^* = -1,02 \cdot 10^{-4}$.

В табл. 3 представлены вычисленные экстремальные вклады трех групп соседних зерен с экстремальной ориентацией каждого зерна, соответствующие максимальному положительному и минимальному отрицательному вкладам взаимодействий в деформацию центрального зерна. Моделирование показало, что, как и в случае кубической упругой симметрии зерен, как аддитивные поправки от одного зерна, так и суммарные поправки от группы зерен при ориентациях окружающих зерен заключены между маргинальными значениями, приведенными в табл. 3.

Максимальная деформация $\varepsilon_{33}^{(\xi)} = 4,1282 \cdot 10^{-4}$ превосходит макродеформацию $\varepsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$ на 37,6 %. Экстремальные вклады соответствуют определенным ориентациям всех 342 взаимодействующих зерен, схематически изображенных на рис. 4, на котором для краткости показаны только первые две группы зерен-соседей.

Значки внутри зерен условно показывают ориентации кристаллографических осей каждого зерна в кластере посредством проекций гексагона на плоскость рисунка. Вращение гексагона в пространстве привязано к поворотам кристаллографических осей. Углы поворотов для экстремальных ориентаций вычисляются алгоритмом.

Одинаково ориентированные зерна в центральном ряду на рис. 4, *a* образуют одно длинное суперзерно. Всего лишь два зерна из этого ряда – одно сверху и другое снизу центрального зерна – дают 34,7 % от общего вклада 26 ближайших зерен.

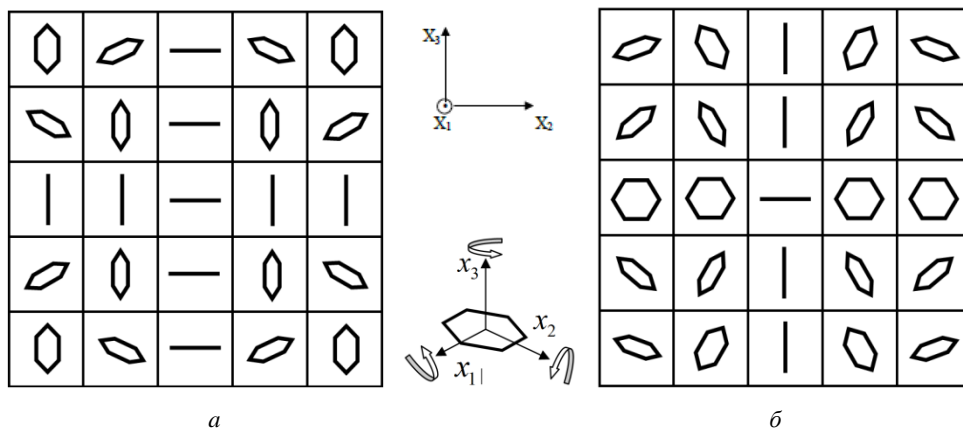


Рис. 4. Экстремальные кластеры в титане: *a* – максимизирующий; *b* – минимизирующий

Fig. 4. Extreme clusters for titanium: *a* – maximizing; *b* – minimizing

Влияние этих двух зерен очень сильное в сравнении с другими зернами. В целом суммарный эффект взаимодействий в титане довольно низкий. Большой 125-зеренный кластер (см. рис. 4, а) дает увеличение локальной деформации над макродеформацией всего на 26,8 %, а намного больший 343-зеренный кластер (не показан на рисунке) – только на 37,6 %.

В качестве последнего примера рассмотрим поликристаллический цинк – материал с сильно анизотропными зернами. Тензор модулей упругости монокристалла цинка имеет следующие значения компонентов в кристаллографической системе координат: $C_{1111}^0 = 165,0$ ГПа, $C_{3333}^0 = 62,0$ ГПа, $C_{1122}^0 = 31,0$ ГПа, $C_{1133}^0 = 50,0$ ГПа, $C_{2323}^0 = 39,6$ ГПа. Отношение периодов кристаллической решетки равно $c/a = 1,856$. Макроскопические упругие постоянные поликристаллического цинка равны: модуль Юнга $E = 110,2$ ГПа, модуль сдвига $\mu = 44,1$ ГПа, коэффициент Пуассона $\nu = 0,25$. Поликристалл цинка подвержен одноосному растяжению с напряжением $\sigma_{33}^* = 33,1$ МПа. Это соответствует макродеформациям $\epsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$, $\epsilon_{11}^* = \epsilon_{22}^* = -0,75 \cdot 10^{-4}$.

В табл. 3 показаны вклады трех групп зерен в двух экстремальных конфигурациях, дающих соответственно максимальные положительные и минимальные отрица-

тельные поправки от взаимодействий в деформацию в центральном зерне кластера. Приведены также решения для полной деформации, соответствующие абсолютному максимуму и абсолютному минимуму деформации в центральном зерне, теоретически достижимым при заданном макронагружении.

В промежуточных, неэкстремальных конфигурациях всех зерен кластера полная деформация в центральном зерне флуктуирует в широких пределах между маргинальными значениями от $-3,6629 \cdot 10^{-4}$ до $+10,6668 \cdot 10^{-4}$. Эти пределы соответствуют учету взаимодействия до удаления на три размера зерна. При учете взаимодействий с более удаленными зернами пределы флуктуаций еще более расширяются. Вклады от каждой групп зерен по отдельности, как и в предыдущих примерах, флуктуируют в почти симметричных пределах со средним значением, близким к нулю, и медленно убывают с расстоянием. Эффект взаимодействия анизотропных зерен цинка на мезодеформации очень сильный. Экстремальные кластеры производят очень высокую концентрацию деформаций. В максимизирующем кластере деформация растяжения в центральном зерне $\epsilon_{33}^{(\xi)} = 10,6668 \cdot 10^{-4}$ превосходит макродеформации в 3,5 раза. В минимизирующем кластере центральное зерно подвергается сильному сжатию $\epsilon_{33}^{(\xi)} = -3,6629 \cdot 10^{-4}$.

Таблица 3

Цинк: экстремальные деформации и вклады различных групп зерен

Table 3

Zinc. Extreme strain and contributions of different groups of grains

Макродеформация $\epsilon_{33}^* = 3,0 \cdot 10^{-4}$		Вклады групп зерен				Полная деформация $\epsilon_{33}^{(\xi)}$
		$\epsilon_{33}^{(0)(\xi)}$	$\epsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{26}$	$\epsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{98}$	$\epsilon_{33}^{(1)(\xi)} _{218}$	
Центр ξ -го зерна	максимум	$4,5535 \cdot 10^{-4}$	$2,8716 \cdot 10^{-4}$	$1,9449 \cdot 10^{-4}$	$1,2968 \cdot 10^{-4}$	$10,6668 \cdot 10^{-4}$
	минимум		$-3,6581 \cdot 10^{-4}$	$-2,1001 \cdot 10^{-4}$	$-1,4382 \cdot 10^{-4}$	$-3,6629 \cdot 10^{-4}$

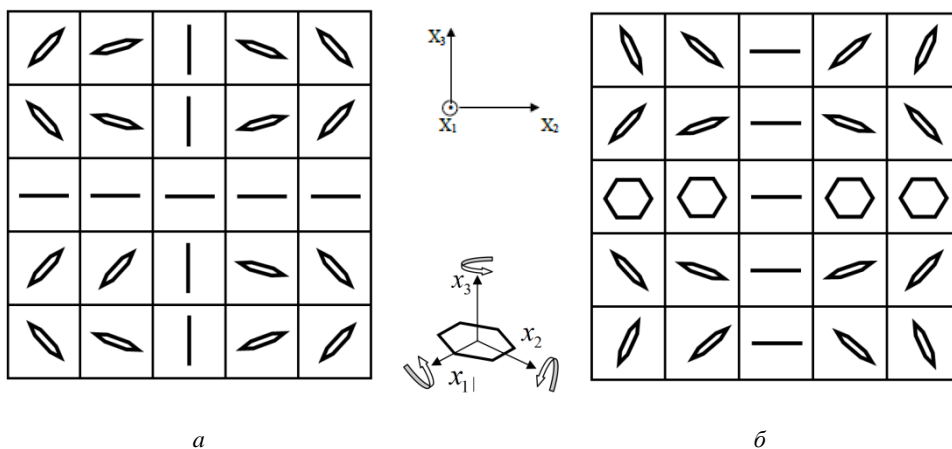


Рис. 5. Экстремальные кластеры в цинке: а – максимизирующий; б – минимизирующий

Fig. 5. Extreme clusters for zinc: a – maximizing; b – minimizing

На рис. 5 показаны паттерны 125-зеренных кластеров, дающие максимальную и минимальную деформации в центральном зерне.

В поликристаллическом цинке межзеренное взаимодействие деформаций очень велико. Всего два зерна, одно непосредственно слева, а другое непосредственно справа от центрального, дают рост мезодеформации на 66,5 % выше макродеформации. Эти зерна образуют небольшое суперзерно, ориентированное перпендикулярно направлению растяжения. Не очень большой кластер из 26 ближайших зерен производит концентрацию деформаций в 247,5 % от макродеформации. Кроме упомянутого суперзерна, из трех зерен в этом кластере можно выделить несколько других малых субкластеров из трех зерен, дающих рост концентрации деформаций на 40–50 % каждый по отдельности. Таким образом, в цинке может случайно появиться довольно большое число малых, следовательно, имеющих заметную вероятность образования, субкластеров с существенной концентрацией мезодеформаций.

Заключение

Экспериментально обнаруженные экстремальные кластеры (ссылки приведены во введении) состоят всего из 3–4 зерен. Концентрация деформаций в кластерах обусловлена в значительной степени взаимодействием зерен в них [2]. Целью работы являлось теоретически показать, что в больших кластерах, в которых взаимодействует гораздо большее число зерен, чем в экспериментально наблюдаемых, возможна очень высокая концентрация, а также найти возможные паттерны таких кластеров. Для этого в работе предложен эффективный вычислительный метод поиска экстремальных кластеров зерен, основанный на теоретико-полевом подходе к описанию деформирования поликристаллов. Преимущества метода следуют из аддитивности решения краевой задачи деформирования в интегральной форме по взаимодействию деформаций. В качестве примера применения метода произведен вычислительный поиск паттернов кластеров, в которых достигает экстремума продольная компонента деформации при простом одноосном растяжении. Вычисления выполнены для двух наиболее распространенных сингоний конструктивных материалов – кубической и гексагональной плотной упаковки. В каждой из них исследованы поликристаллические материалы с низкой и высокой степенями анизотропии зерен.

Во всех рассмотренных случаях экстремальные кластеры имеют форму симметричных паттернов. В целом симметрия паттернов соответствует направлению нагрузки и ориентации кристаллографических осей зерна, в котором ищется максимальная деформация. Некоторые взаимодействующие зерна, особенно вне вертикальных или горизонтальных рядов на вышеприведен-

ных рисунках, имеют по несколько эквивалентных ориентаций, дающих одинаковый вклад. На всех рисунках показана только одна из этих возможных эквивалентных ориентаций для каждого зерна. Наличие эквивалентных ориентаций зерен повышает вероятность случайной реализации экстремальных кластеров или субкластеров в материалах.

Приведенные в таблицах значения экстремальных деформаций являются абсолютными. Они соответствуют вполне определенным ориентациям взаимодействующих зерен (схематически изображенным на рисунках). Вычислительные эксперименты показали, что фактически вклад каждого зерна является полой функцией углов Эйлера ориентации зерна в окрестности экстремумов. Разработанный алгоритм позволяет вычислять вероятность того, что при случайной выборке какое-либо из взаимодействующих зерен окажется в позиции с аддитивным вкладом, превышающим наперед заданное значение. Например, вероятность зерну слева от центрального зерна на рис. 5 слева (цинк) оказаться в конфигурации, которая дает вклад не менее 50 % от максимально возможного для этого зерна, составляет 0,154. Такая же вероятность для зерна справа от центрального зерна. Эти вероятности достаточно высоки для случайного образования малого экстремального кластера в стохастической микроструктуре большого поликристаллического тела. Такой кластер из трех зерен приведет к увеличению деформации на 33,25 % по сравнению с макродеформацией. Большие экстремальные кластеры имеют гораздо меньшую, но все же конечную вероятность возникновения. Редкие явления образования крупных кластеров могут быть причиной, например, большого разброса пределов усталости поликристаллических материалов при сверхвысокоцикловых испытаниях, экспериментально измеряемых на стандартных образцах. Появление достаточно большого экстремального кластера в калибровочной части одного образца может привести к значительному отклонению (уменьшению) предела выносливости этого образца от среднего значения по партии образцов.

Экстремальные кластеры работают как своеобразные упругие линзы. Они «преломляют» внешнюю нагрузку и «фокусируют» ее на центральном зерне. Некоторые экстремальные кластеры увеличивают деформации в определенных зернах, а другие – уменьшают их. Диапазон изменения состояния выбранного зерна очень широк. Для поликристаллов с сильно анизотропными зернами мезоскопическое состояние интересующего зерна может качественно отличаться от макроскопического состояния образца.

Здесь мы рассмотрели только простой случай одноосного растяжения и нашли кластеры, максимизирующие только одну компоненту деформации, поскольку одной из целей была демонстрация вычисли-

тельной работоспособности метода. Метод применим для поиска экстремальных кластеров при произвольном трехосном нагружении и нахождения микроструктур, приводящих к максимумам любых комбинаций компонентов тензора мезодеформаций, включая мезонапряжения, являющиеся в соответствии с законом Гука линейными комбинациями деформаций. Экстремальные кластеры для других типов макроагружения и тех, в которых максимума достигают другая компонента деформации или какая-либо комбинация компонентов мезодеформации, будут иметь разные паттерны. Эти другие паттерны могут быть менее симметричными.

Библиографический список

- Miao J., Pollock T.M., Jones J. Microstructural extremes and the transition from fatigue crack initiation to small crack growth in a polycrystalline nickel-base superalloy // *Acta Mater.* – 2012. – Vol. 60. – P. 2840–2854.
- Abdolvand H., Wright J., Wilkinson A.J. 2018 Strong grain neighbour effects in polycrystals // *Nature. Commun.* – 2018. – Vol. 9, no 171. – P. 1–11.
- Oja M., Chandran K.S.R., Tyron R.J. 2010 Orientation Imaging Microscopy of Fatigue Crack Formation in Waspaloy: Crystallographic conditions for crack nucleation // *Int. J. Fatigue.* – 2010. – Vol. 32. – P. 551–556.
- Birosca S. The deformation behaviour of hard and soft grains in RR1000 nickel-based superalloy // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* – 2015. – Vol. 82. – P. 012033
- Zimmermann M. Diversity of damage evolution during cyclic loading at very high numbers of cycles // *Int. Mater. Rev.* – 2012. – Vol. 57. – P. 73–91.
- In situ observation of collective grain-scale mechanics in Mg and Mg-rare earth alloys / F. Wang, S. Sandlobes, M. Diehl, L. Sharma, F. Roters, D. Raabe // *Acta Mater.* – 2014. – Vol. 80. – P. 77–93.
- Winther G. and Oddershede J. Intragranular orientation spread induced by grain interaction // *TMS 145th Annual Meeting & Exhibition (Nashville, United States).* – 2016.
- Pollock T. Alloy design for aircraft engines // *Nature Mater.* – 2016. – Vol. 15. – P. 809–815.
- Guilhem Y., Basseville S., Curtit F., Stephan J.-M., Cailletaud G. Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals // *Int. J. Fatigue.* – 2010. – Vol. 32. – P. 1748–1763.
- Dunne F.P.E., Walker A., Rugg D. A systematic study of hcp crystal orientation and morphology effects in polycrystal deformation and fatigue // *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.* – 2007. – Vol. 463. – P. 1467–1489.
- Investigation of three-dimensional aspects of grain-scale plastic surface deformation of an aluminum oligocrystal / Z. Zhao, M. Ramesh, D. Raabe, A.M. Cuitin, R. Radovitzky // *Int. J. Plast.* – 2008. – Vol. 24. – P. 2278–2297.
- Davidson D.L. The effect of a cluster of similarly oriented grains (a supergrain) on fatigue crack initiation characteristics of clean materials // *VHCF-4. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society).* – 2007
- Oddershede J. Measuring Grain Resolved Stresses during in situ Plastic Deformation using 3DXRD // *International Symposium on Plasticity 2012 and Its Current Applications (San Juan, Puerto Rico).* – 2012.
- Intragranular three-dimensional stress tensor fields in plastically deformed polycrystals / Y. Hayashi, D. Setoyama,

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации на выполнение фундаментальных научных исследований (проект № FSNM-2020-0027).

Acknowledgments

The results were obtained as part of the State Assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation for Basic Scientific Research (Project No. FSNM-2020-0027).

Y. Hirose, T. Yoshida, H. Kimura // *Science.* – 2019. – Vol. 366. – P. 1492–1496.

15. In-situ grain resolved stress characterization during damage initiation in Cu-10%W alloy / R. Pokharel, R.A. Lebensohn, D.C. Pagan [et al.] // *JOM.* – 2020. – Vol. 72. – P. 48–56.

16. Juul N.Y., Oddershede J., Winther G. Analysis of Grain-Resolved Data from Three-Dimensional X-Ray Diffraction Microscopy in the Elastic and Plastic Regimes // *JOM.* – 2020. – Vol. 72. – P. 83–90.

17. Woo W., Ohnuma M., Wang X.-L. Engineering Application Neutron Scattering - Applications in Biology, Chemistry, and Materials Science (Experimental Methods in the Physical Sciences Vol. 49) – Chapter 12 / ed. Felix Fernandez-Alonso, David L. Price. – Cambridge, MA: Academic Press, 2017. – P. 739–753.

18. Benedetti I., Barbe F. Modelling Polycrystalline Materials: An Overview of Three-Dimensional Grain-Scale Mechanical Models // *Journal of Multiscale Modelling.* – 2013. – Vol. 5. – P. 1350002.

19. Microstructure-based Description of the Deformation of Metals: Theory and Application / D. Helm, F. Buta, D. Raabe, P. Gumbsch // *JOM.* – 2011. – Vol. 63. – P. 26–32.

20. Shavshukov V.E. and Tashkinov A.A. 2016 Quantum Field Theory Approach to Mechanics of Polycrystals // *Solid State Phenomena.* – 2016. – Vol. 243. – P. 131–138. DOI: 10.4028/www.scientific.net/SSP.243.131

21. Mura T. *Micromechanics of Defects in Solids.* – 2nd ed. – Dordrecht: Nijhoff, 1987. – 587 p.

22. DeWit R. Continuum theory of stationary dislocations // *Solid State Phys.* – 2010. – Vol. 10. – P. 249–292.

23. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Inhomogeneities in grains of polycrystalline materials and Eshelby problem // *PNRPU Mechanics Bulletin.* – 2018. – No. 1. – P. 58–72.

24. Stochasticity in materials structure, properties, and processing – A review / R. Hull [et al.] // *Applied Physics Reviews.* – 2018. – Vol. 5. – P. 1–28. DOI: 10.1063/1.4998144

25. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука, 1977. – 400 с.

26. Pan E., Chen W. *Static Green's Functions in Anisotropic Media.* – Cambridge University Press, New York, 2015. – 337 p.

27. Xie L., Hwu C., Zhang C. Advanced methods for calculating Green's function and its derivatives for three-dimensional anisotropic elastic solids // *Int. J. Sol. Struct.* – 2016. – Vol. 80. – P. 261–273. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2015.11.012

28. Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е. Решение задач механики деформирования поликристаллических материалов на основе теории возмущений // *Вычислительная механика*

сплошных сред. – 2016. – Т. 9, № 4. – С. 486–497. DOI:10.7242/1999-6691/2016.9.4.4

29. Богачев И.Н., Вайнштейн А.А., Волков С.Д. Статистическое металловедение. – М.: Металлургия, 1984. – 176 с.

References

1. Miao J., Pollock T.M., Jones J. Microstructural extremes and the transition from fatigue crack initiation to small crack growth in a polycrystalline nickel-base superalloy. *Acta Mater*, 2012, vol. 60, pp. 2840-2854.

2. Abdolvand H., Wright J. and Wilkinson A.J. 2018 Strong grain neighbour effects in polycrystals. *Nature. Commun*, 2018, vol. 9, no 171, pp. 1–11.

3. Oja M., Chandran K.S.R. and Tyron R.J. 2010 Orientation Imaging Microscopy of Fatigue Crack Formation in Waspaloy: Crystallographic conditions for crack nucleation. *Int. J. Fatigue*, 2010, vol. 32, pp. 551–556.

4. Biroasca S. The deformation behaviour of hard and soft grains in RR1000 nickel-based superalloy. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng*, 2015, vol. 82, pp. 012033

5. Zimmermann M. Diversity of damage evolution during cyclic loading at very high numbers of cycles. *Int. Mater. Rev*, 2012, vol. 57, pp. 73-91

6. Wang F., Sandlobes S., Diehl M., Sharma L., Roters F., Raabe D. In situ observation of collective grain-scale mechanics in Mg and Mg–rare earth alloys. *Acta Mater*, 2014, vol. 80, pp. 77–93.

7. Winther G. and Oddershede J. Intragranular orientation spread induced by grain interaction. *TMS 145th Annual Meeting & Exhibition (Nashville, United States)*, 2016.

8. Pollock T. Alloy design for aircraft engines. *Nature Mater*, 2016, vol. 15, p. 809–815.

9. Guilhem Y., Basseville S., Curtit F., Stephan J.-M., Cailletaud G. Investigation of the effect of grain clusters on fatigue crack initiation in polycrystals. *Int. J. Fatigue*, 2010, vol. 32, pp. 1748-1763.

10. Dunne F.P.E., Walker A. and Rugg D. A systematic study of hcp crystal orientation and morphology effects in polycrystal deformation and fatigue. *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci*, 2007, vol. 463, pp. 1467–1489.

11. Zhao Z., Ramesh M., Raabe D., Cuitin A.M., Radovitzky R. Investigation of three-dimensional aspects of grain-scale plastic surface deformation of an aluminum oligocrystal. *Int. J. Plast*, 2008, vol. 24, P. 2278–2297.

12. Davidson D.L. The effect of a cluster of similar oriented grains (a supergrain) on fatigue crack initiation characteristics of clean materials. *VHCF-4. TMS (The Minerals, Metals & Materials Society)*, 2007

13. Oddershede J. Measuring Grain Resolved Stresses during in situ Plastic Deformation using 3DXRD. *International Symposium on Plasticity 2012 and Its Current Applications (San Juan, Puerto Rico)*, 2012.

14. Hayashi Y., Setoyama D., Hirose Y., Yoshida T., Kimura H. Intragranular three-dimensional stress tensor fields in plastically deformed polycrystals. *Science*, 2019, vol. 366, pp. 1492–1496.

15. Pokharel R., Lebensohn R.A., Pagan D.C. et al. In-situ grain resolved stress characterization during damage initiation in Cu-10%W alloy. *JOM*, 2020, vol. 72, pp. 48–56.

16. Juul N.Y., Oddershede J. and Winther G. Analysis of Grain-Resolved Data from Three-Dimensional X-Ray Diffraction

30. Францевич И.Н., Воронов Ф.Ф., Бакута С.А. Упругие постоянные и модули упругости металлов и неметаллов. – Киев: Наукова думка, 1982. – 288 с.

31. CRC Handbook of Chemistry and Physics, ed. David R. Lide. – CRC Press LLC, 2004. – 2475 p.

Microscopy in the Elastic and Plastic Regimes // *JOM*, 2020, vol. 72, pp. 83–90.

17. Woo W., Ohnuma M., Wang X.-L. Engineering Application Neutron Scattering - Applications in Biology, Chemistry, and Materials Science (Experimental Methods in the Physical Sciences vol 49) - Chapter 12, ed. Felix Fernandez-Alonso, David L. Price, Cambridge, MA: Academic Press, 2017, pp. 739-753

18. Benedetti I. and Barbe F. Modelling Polycrystalline Materials: An Overview of Three-Dimensional Grain-Scale Mechanical Models. *Journal of Multiscale Modelling*, 2013, vol. 5, pp. 1350002.

19. Helm D., Buta F., Raabe D., and Gumbsch P. Microstructure-based Description of the Deformation of Metals: Theory and Application. *JOM*, 2011, vol. 63, pp. 26-32.

20. Shavshukov V.E. and Tashkinov A.A. 2016 Quantum Field Theory Approach to Mechanics of Polycrystals. *Solid State Phenomena*, 2016, vol. 243, pp. 131-138. DOI:10.4028/www.scientific.net/SSP.243.131

21. Mura T. Micromechanics of Defects in Solids. 2nd edn, *Dordrecht: Nijhoff*, 1987, 587 p.

22. DeWit R. Continuum theory of stationary dislocations. *Solid State Phys*, 2010, vol. 10, pp. 249-292.

23. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Inhomogeneities in grains of polycrystalline materials and Eshelby problem. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no.1, pp. 58–72.

24. Hull R., et al. Stochasticity in materials structure, properties, and processing - A review. *Applied Physics Reviews*, 2018, vol.5, pp. 1-28. DOI:10.1063/1.4998144.

25. Shermergor T.D. Teorija uprugosti mikroneodnorodnykh sred [Theory of elasticity of micro inhomogeneous media]. *Moscow, Nauka*, 1977, 400 p

26. Pan E. and Chen W. Static Green's Functions in Anisotropic Media. *New York, Cambridge University Press*, 2015, 337 p.

27. Xie L., Hwu C., Zhang C.. Advanced methods for calculating Green's function and its derivatives for three-dimensional anisotropic elastic solids. *Int. J. Sol. Struct.*–2016, vol.80, pp.261-273. DOI:10.1016/j.ijsolstr.2015.11.012.

28. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Reshenie zadach mekhaniki deformirovaniya polikristallicheskich materialov na osnove teorii vozmushchenii [Solving the problems of deformation mechanics of polycrystalline materials on the basis of perturbation theory]. *Vychislitelnaia mekhanika sploshnykh sred*. 2016, vol. 16, no. 4, pp. 486-497. DOI: 10.7242/1999-6691/2016.9.4.41

29. Bogachev I.N., Vainshtein A.A., Volkov S.D. Statisticheskoe metallovvedenie [Statistical metallography]. *Moscow, Metallurgiya*, 1974, 176 p.

30. Franchevich I.N., Voronov F.F., Bakuta S.A. Uprugie postoyannye I moduli uprugosti metallov I nemetallov [Elastic constants and moduli of metals and nonmetals]. *Kiev, Naukova Dumka*, 1982, 286 p.

31. CRC Handbook of Chemistry and Physics, ed. David R. Lide, *CRC Press LLC*, 2004, 2475 p.