

УДК 539.3

К.В. Мацюк, П.В. Трусов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Пермь, Россия

МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ УПРУГОВЯЗКОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ГПУ-КРИСТАЛЛОВ: НЕСИММЕТРИЧНЫЕ МЕРЫ НАПРЯЖЕННО- ДЕФОРМИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ, ЗАКОНЫ УПРОЧНЕНИЯ

Настоящая статья посвящена описанию модели мезоуровня как важнейшей составляющей разрабатываемой двухуровневой модели поликристалла. Анализируются особенности упруговязкопластического деформирования монокристаллов с гексагональной плотноупакованной решеткой (ГПУ), осуществляемого за счет движения краевых дислокаций и двойникового. Использование упруговязкопластической модели позволяет избежать проблем, существующих в других моделях, например неединственности определения скоростей сдвигов. Процесс двойникового можно рассматривать с помощью дислокационных механизмов, что позволяет описывать его как скольжение. Обосновывается необходимость применения несимметричных мер напряженного и деформированного состояния на мезоуровне; несимметричная мера скорости деформации является не зависящей от выбора системы отсчета. Приведены соотношения модели кристаллита с использованием предложенных мер напряжений и деформаций. Принимаемые в работе варианты законов упрочнения физически обоснованы. Предложенный вариант закона упрочнения для двойникового позволяет получить результаты, которые согласуются с экспериментальными данными: в ГПУ-кристаллах двойникование осуществляется быстро, затем приостанавливается, так как двойники одних систем препятствуют распространению двойников других систем. Рассматривается применение упруговязкопластической модели для описания неупругого деформирования материалов с ГПУ-решеткой на примере α -титана. Разработан алгоритм определения напряженно-деформированного состояния; модель применена для исследования простых нагружений. Приведены описание и анализ полученных численных результатов с учетом упрочнения. Исследовано влияние вида нагружения на характер деформирования (упрочнение, объемную долю двойников и т.д.).

Ключевые слова: ГПУ-кристаллы, скольжение, двойникование, несимметричные меры напряженного и деформированного состояния, законы упрочнения.

K.V. Matsyuk, P.V. Trusov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

**MODEL FOR DESCRIPTION VISCOELASTOPLASTIC
DEFORMATION OF HCP CRYSTALS: ASYMMETRIC
STRESS MEASURES, HARDENING LAWS**

The article is dedicated to the mesolevel model of elastoviscoplastic deformation of hexagonal close-packed crystal (HCP). This model of mesolevel is the main part of the developed two-level model of polycrystal. The features of elastoviscoplastic deformation of HCP-monocrystal carried out by the motion of edge dislocations and twinning are analyzed. The use of the elastoviscoplastic model allows avoiding the problem that occurs in other models, for example, the problem of determination non-uniqueness shear rates. Due to the dislocation nature of twinning, it can be treated as a slip. The necessity of application the asymmetric measure the stress strain state on mesolvel is justified; the asymmetric measure of deformation rate does not depend on the reference system. The relations of the crystalline model using the proposed measure of the stress strain are given. The variants of hardening laws accepted in this work are physically substantiated. The proposed variant of the hardening law for twinning is able to get the results which conform with the experimental data: twinning in HCP crystal is carried out quickly then-suspended, because twins of the twinning system prevent spreading of twins in other systems. The usage of the elastoviscoplastic model for the description of inelastic deformation materials with the HCP-lattice with α -titanium as an example is considered. The algorithm of definition the stress strain state is developed; the model is used for the study of simple load cases. The description and analyses of the obtained results of numerical calculation with hardening is stated. The influence of load cases on the nature of the deformation (hardening, volume fraction of twins, etc.) is investigated.

Keywords: HCP-crystals, dislocation slip, twinning, asymmetric measures of stress-strain state, hardening laws.

Введение

Процессы деформирования и свойства поликристаллических материалов, рабочие характеристики изделий из них определяются внутренней структурой материала, поэтому в настоящее время одним из интенсивно развивающихся направлений моделирования неупругого деформирования моно- и поликристаллов является создание и модификация физических теорий пластичности (ФТП), в основе построения которых лежит рассмотрение механизмов деформирования на мезо- и микроуровне. Актуальность создания таких моделей обусловлена необходимостью прогнозировать физико-механические характеристики материала на макроуровне, а также возможностью разработки технологий получения материалов с заданными свойствами, необходимыми для эксплуатации.

Использование многоуровневого подхода с явным введением в модель описания наиболее существенных механизмов деформирования и их носителей, относящихся к различным масштабным уровням, позволяет отражать структуру естественным образом, более корректно определять связи макронапряжений и макродеформаций [1, 2]. При использовании такого подхода каждой материальной точке (представительному объему) на некотором масштабном уровне ставится в соответствие неоднородная область на более низком масштабном уровне. Применение многоуровневых моделей для решения краевых задач подразумевает использование итерационной процедуры в каждый момент времени для определения согласованных параметров процесса на всех масштабных уровнях. Число рассматриваемых уровней определяется исследователем. Несмотря на все достоинства и преимущества, многоуровневый подход, как и любая методика, обладает недостатками. К таковым можно отнести отсутствие аналитического решения задачи, большое число неявных внутренних переменных мезоуровня, что приводит к большим запросам по ресурсам памяти и времени счета ЭВМ, сложности и высокой трудоемкости разработки программ для ЭВМ.

При интенсивных пластических деформациях на мезоуровне значительную роль играет ротационная мода, при описании которой в уравнении баланса момента количества движения появляются моментные напряжения, тензор напряжений становится несимметричным [3, 4]. Под ротационной модой понимают повороты решетки, обусловленные как квазижестким поворотом представительного макрообъема, так и несовместностью скольжения дислокаций в соседних зернах. При больших деформациях возможно появление субзерен или фрагментов зерен, которые разворачиваются относительно друг друга начиная от границ с соседними зернами [5]. С другой стороны, для описания основных мод неупругой деформации (скольжения краевых дислокаций и двойникования) требуется введение несимметричной меры деформации, согласованной с физически реализуемыми механизмами деформирования по системам скольжения (СС) и системам двойникования (СД) [3, 4].

Число рассматриваемых уровней при моделировании определяется исходя из детального анализа исследуемого процесса, известных или предполагаемых механизмов деформирования. Наиболее часто используемыми при исследовании неупругого деформирования поликри-

сталлических материалов являются двухуровневые модели. В таких моделях рассмотрение ведется на двух уровнях: макроуровне (уровне представительного макрообъема) и мезоуровне (уровне кристаллита) [1, 2, 6, 7]. При моделировании поликристаллических материалов необходим детальный анализ физических механизмов деформирования, и как следствие – поведения кристаллитов, чему и посвящена настоящая статья.

В предлагаемой статье обсуждаются некоторые важные аспекты построения и результаты реализации конститутивной модели кристаллита с гексагональной плотноупакованной ГПУ-решеткой, позволяющей описывать упруговязкопластическое деформирование при произвольном кинематическом нагружении с учетом анизотропии свойств материала.

1. Особенности деформирования ГПУ-кристаллов

В работе рассматривается применение упруговязкопластической модели для описания неупругого деформирования материалов с ГПУ-решеткой на примере α -титана. Титан обладает высокой коррозионной стойкостью, коррозионно-механической прочностью, эрозионно-кавитационной стойкостью, нехладноломкостью, немагнитностью и другими физическими характеристиками, которые позволяют рассматривать титановые сплавы как материалы, сочетающие в себе лучшие свойства разнообразных материалов (железо, углерод, хром, кремний и т.д.). Титановые сплавы нашли широкое применение в аэрокосмической промышленности, судостроении, химической промышленности (арматура, фильтры, сушилки и т.д.), пищевой промышленности (реакторы, центрифуги).

Обратимся к особенностям деформирования ГПУ-кристаллов. Данный вопрос является важным для понимания физической природы рассматриваемого процесса, а следовательно, для построения соотношений модели, которая бы с достаточной степенью адекватности описывала исследуемый объект.

ГПУ-кристаллы характеризуются высокой степенью анизотропии как упругих, так и пластических свойств. Это связано со значительной несимметрией пространственной решетки, которая тем сильнее выражена, чем больше параметр c/a (отношение расстояния между базисными плоскостями к межатомному расстоянию ближайших атомов

в базисной плоскости) [8]. От отношения c/a зависят соотношение плотности атомов в различных направлениях и плотность упаковки в различных плоскостях, что в значительной мере предопределяет расположение плоскостей первичного («легкого») скольжения, систем двойникования и т.д. Характерные кристаллографические системы скольжения ГПУ-кристаллов перечислены в табл. 1.

Таблица 1

Системы скольжения ГПУ-кристаллов [9]

Механизм деформации	Плоскость	Направление	Количество систем
Базисное скольжение $\langle a \rangle$	$\{0001\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Призматическое скольжение $\langle a \rangle$	$\{10\bar{1}0\}$	$\langle 11\bar{2}0 \rangle$	3
Пирамидальное скольжение $\langle a + c \rangle$	$\{10\bar{1}\}$	$\langle 11\bar{2}3 \rangle$	12

Наиболее плотноупакованными плоскостями в ГПУ-кристаллах в зависимости от отношения c/a являются либо базисные ($c/a > \sqrt{3}$), либо призматические ($c/a < \sqrt{3}$) плоскости. Для α -титана соотношение $c/a = 1,587$. Зачастую при низких и умеренных температурах скольжение по пирамидальным плоскостям не реализуется в силу низкой плотности упаковки, что, в свою очередь, приводит к достаточно высоким критическим напряжениям в них.

Пластическое деформирование осуществляется при прохождении краевых дислокаций по так называемым активным системам скольжения (СС). Условием активации k -й СС является выполнение закона Шмида:

$$\hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma} = \tau_{sc}^{(k)}, \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{b}}^{(k)}, \hat{\mathbf{n}}^{(k)}$ – единичный вектор в направлении вектора Бюргера и единичная нормаль в текущей конфигурации k -й СС; $\tau_{sc}^{(k)}$ – критическое напряжение сдвига k -й СС; $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши (однородный по рассматриваемому зерну).

Для оценки начального критического напряжения можно использовать соотношение Пайерлса–Набарро [10]:

$$\tau_{\text{П-Н}} = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left(-\frac{2\pi d}{(1-\nu)b}\right), \quad (2)$$

где G – модуль сдвига, в качестве которого будем использовать модуль для изотропного тела (поликристалла) с равномерным распределением ориентаций; ν – коэффициент Пуассона; b – модуль вектора Бюргерса; d – расстояние между атомными плоскостями. Получены следующие оценки напряжения Пайерлса–Набарро для различных систем скольжения α -титана ($c/a < \sqrt{3}$):

$$\tau_{\text{П-Н}\{10\bar{1}0\}\langle\bar{1}2\bar{1}0\rangle} < \tau_{\text{П-Н}\{0001\}\langle\bar{1}2\bar{1}0\rangle} < \tau_{\text{П-Н}\{10\bar{1}1\}\langle11\bar{2}3\rangle},$$

для ГПУ-кристалла, для которого соотношение $c/a > \sqrt{3}$ (например, Zn):

$$\tau_{\text{П-Н}\{0001\}\langle\bar{1}2\bar{1}0\rangle} < \tau_{\text{П-Н}\{10\bar{1}0\}\langle\bar{1}2\bar{1}0\rangle} < \tau_{\text{П-Н}\{10\bar{1}1\}\langle11\bar{2}3\rangle}.$$

Из оценок критических напряжений Пайерлса–Набарро следует, что плоскостями «легкого» скольжения для соотношения $c/a < \sqrt{3}$ ($c/a > \sqrt{3}$) являются призматические (базисные) плоскости.

Наряду со скольжением краевых дислокаций в ГПУ-кристаллах уже на ранних стадиях деформирования наблюдается двойникование [8]. Двойникованию способствуют низкая температура и высокоскоростное нагружение, так как с понижением температуры и увеличением скорости деформации критическое напряжение для скольжения растет быстрее, чем для двойникования. Данный тип неупругого деформирования не является преобладающим в металлах с большим числом систем скольжения (ГЦК- и ОЦК-кристаллы) и в основном происходит в металлах, в которых скольжение дислокаций ограничено (ГПУ-кристаллы). Однако экспериментально установлено, что деформирование двойникованием происходит также в ОЦК- и ГЦК-металлах при низких гомологических температурах и в материалах с низкой энергией дефекта упаковки.

Изменение конфигурации кристаллита при двойниковании может быть описано посредством сдвига (рис. 1). Для рассмотрения механического двойникования введем следующие обозначения:

K_1 – плоскость двойникового (габитусная плоскость), которая остается неискаженной при двойниковании; η_1 – направление двойникового сдвига; S – плоскость сдвига, перпендикулярная плоскости K_1 и содержащая направление η_1 ; K_2 – вторая неискаженная плоскость; η_2 – направление, лежащее в плоскости K_2 и плоскости S .

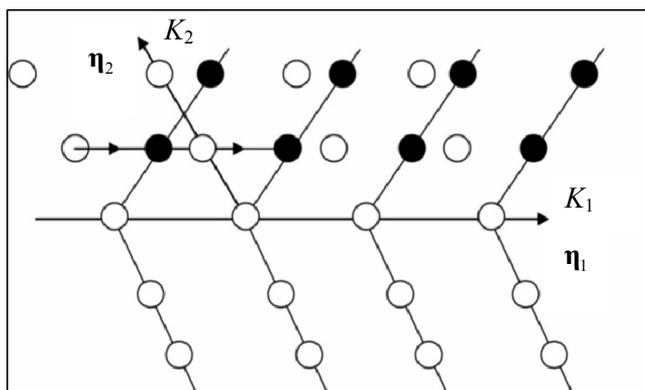


Рис. 1. Геометрия двойникования в ГПУ-решетке

Способы двойникования в кристаллах с ГПУ-решеткой довольно разнообразны, что также обусловлено существенной анизотропией свойств ГПУ-кристаллов. Гексагональные кристаллы двойникуются по системам

$$K_1 = \{10\bar{1}2\}, \eta_1 = [\bar{1}011], K_2 = \{10\bar{1}\bar{2}\}, \eta_2 = [10\bar{1}1].$$

Основные кристаллографические плоскости двойникования для α -титана перечислены в табл. 2.

Таблица 2

Системы двойникования ГПУ-кристаллов [9]

Механизм деформации	Плоскость	Направление	Количество СД
Двойники сжатия	$\{11\bar{2}2\}$	$\langle 11\bar{2}\bar{3} \rangle$	6
Двойники растяжения	$\{10\bar{1}2\}$	$\langle \bar{1}011 \rangle$	6

Возникновение терминов (двойники сжатия и растяжения) непосредственно связано с тем, что при высоких температурах при растя-

жении вдоль оси $\langle c \rangle$ в $\alpha-Ti$ обычно происходит двойникование по системам $\{10\bar{1}2\}\langle\bar{1}011\rangle$, а при относительно низких температурах при сжатии вдоль оси $\langle c \rangle$ в $\alpha-Ti$ идет двойникование по системам $\{11\bar{2}2\}\langle11\bar{2}\bar{3}\rangle$. Степень вовлеченности каждой из систем двойникования в деформацию зависит от температуры испытаний.

Условие активации s -й системы двойникования (СД) имеет вид

$$\hat{b}_{tw}^{(s)} \wedge \hat{n}_{tw}^{(s)} : \sigma = \tau_{twc}^{(s)}, \quad (3)$$

где $\hat{b}_{tw}^{(s)}$, $\hat{n}_{tw}^{(s)}$ – единичный вектор вдоль направления сдвига и нормаль в текущей конфигурации s -й СД, $\tau_{twc}^{(s)}$ – критическое напряжение s -й СД.

Существуют принципиальные отличия процессов скольжения и двойникования. При скольжении ориентация кристалла выше и ниже плоскости скольжения та же, что и до деформации, при двойниковании она различна по отношению к плоскости двойникования. При сдвиге смещение соседних слоев возможно на любую величину, кратную вектору Бюргера. При двойниковании соседние атомные плоскости смещаются на одинаковые расстояния, меньшие межатомного. В отличие от сдвиговой деформации сдвиг при двойниковании полярен, т.е. смещение атомов растет по линейному закону только в одну сторону и может стать сколь угодно большим. Обычно образование двойников приводит к повышению сопротивления пластической деформации за счет дополнительных барьеров, создаваемых двойниковыми границами.

2. Кинематика деформирования ГПУ-кристаллов

Кинематические соотношения являются одним из важнейших элементов физической модели деформирования, в том числе для корректной формулировки законов упрочнения, описывающих взаимодействия рассмотренных выше дефектов.

Как уже отмечалось ранее, при построении моделей неупругого деформирования необходимо переходить к несимметричным мерам напряженно-деформированного состояния (НДС) на мезоуровне. При построении несимметричной физической теории в скоростях возникает вопрос о выборе несимметричной меры скорости деформации на мезоуровне. Обычно в качестве таковой используется градиент скорости

перемещений (определенный в актуальной конфигурации) $\hat{\nabla}\mathbf{v}$, однако указанная мера не является не зависящей от выбора системы отсчета: при наложении жесткого движения появляется дополнительное слабое, равное спину вращательной составляющей наложенного жесткого движения $\boldsymbol{\omega}_ж = \hat{\mathbf{d}}_ж^T \cdot \mathbf{o}_ж$ ($\mathbf{o}_ж$ – ортогональный тензор, определяющий наложенный жесткий поворот). Необходимо отметить, что проблема разложения движения на квазитвердое и деформационное тесно связана с проблемой замыкания, то есть со способом определения явных внутренних переменных в определяющем соотношении на каждом масштабном уровне в рамках многоуровневой конститутивной модели [11].

В качестве меры скорости деформации представляется возможным использовать меру относительного смещения материальных частиц, исключая при этом любое движение среды как жесткого целого [4]:

$$\hat{\nabla}\mathbf{v}_r^T = \hat{\nabla}\mathbf{v}^T - \boldsymbol{\omega}; \quad \hat{\nabla}\mathbf{v}_r = \hat{\nabla}\mathbf{v} + \boldsymbol{\omega}, \quad (4)$$

где \mathbf{v}_r – скорость материальных частиц относительно подвижной системы отсчета, отвечающей за квазитвердое движение [12]; $\hat{\nabla}\mathbf{v}_r$ – градиент скорости относительного движения частиц. Введем следующие обозначения: $\zeta = \hat{\nabla}\mathbf{v}^T$, $\zeta_r = \hat{\nabla}\mathbf{v}_r^T$; индексом r обозначены величины, характеризующие относительное движение, фиксируемое наблюдателем в жесткой подвижной системе отсчета мезоуровня, в качестве каковой на мезоуровне предлагается использовать кристаллографическую систему координат рассматриваемого кристаллита ($\boldsymbol{\omega}$ – спин решетки). Это согласуется с используемым определяющим соотношением (ОС) мезоуровня – законом Гука в скоростной релаксационной форме, записанным с позиций наблюдателя в кристаллографической системе координат: компоненты тензора упругих характеристик «привязаны» к решетке, в качестве меры скорости изменения напряженного состояния принята «решеточная» коротационная производная [6] тензора напряжений Коши.

Введенная для кристаллита мера скорости деформации вида (5) является не зависящей от выбора системы отсчета (индифферентной) [4]. Отметим, что в физических теориях в качестве меры скорости деформации удобно использовать транспонированный градиент относительной скорости $\hat{\nabla}\mathbf{v}_r^T$.

Для описания каждой системы скольжения вводится ориентационный тензор в отсчетной конфигурации:

$$\mathbf{m} = \mathbf{b} \mathbf{n}, \quad k=1, \dots, 24, \quad (5)$$

где \mathbf{b} , \mathbf{n} – единичные направления скольжения и нормали k -й системы скольжения в отсчетной конфигурации, которые преобразуются соответственно в векторы $\hat{\mathbf{b}}^{(k)}, \hat{\mathbf{n}}^{(k)}$ в актуальной конфигурации согласно соотношениям

$$\hat{\mathbf{n}}^{(k)} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{n}, \quad \hat{\mathbf{b}}^{(k)} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{b}, \quad (6)$$

где \mathbf{f}^e – упругая составляющая транспонированного градиента места [11]. Аналогично для систем двойникования

$$\hat{\mathbf{n}}_{tw}^{(s)} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{n}_{tw}^{(s)}, \quad \hat{\mathbf{b}}_{tw}^{(s)} = \mathbf{f}^e \cdot \mathbf{b}_{tw}^{(s)}. \quad (7)$$

Следует отметить, что в промежуточной конфигурации ориентационные тензоры совпадают с ориентационными тензорами в отсчетной конфигурации, поскольку сдвиг оставляет решетку инвариантной, при двойниковании нормаль к габитусной плоскости и направление двойникования также не меняются. Влиянием упругих искажений решетки пренебрегают, поэтому векторы $\hat{\mathbf{n}}, \hat{\mathbf{b}}$ также остаются единичными и ортогональными.

Упруговязкопластические соотношения для скоростей сдвигов и скорости изменения объемной доли двойников $\dot{f}^{(s)}$ приняты в следующем виде [9]:

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_0 H \left(\tau^{(k)} - \tau_{sc}^{(k)} \right) \left(\frac{\tau^{(k)}}{\tau_{sc}^{(k)}} \right)^m, \quad (8)$$

$$\dot{f}^{(s)} = H \left(\tau_{tw}^{(s)} - \tau_{twc}^{(s)} \right) \frac{\dot{\gamma}_{0tw}^{(s)}}{\dot{\gamma}_{tw}^{(s)}} \left(\frac{\tau_{tw}^{(s)}}{\tau_{twc}^{(s)}} \right)^m, \quad (9)$$

где $\dot{\gamma}_0$ ($\dot{\gamma}_{0tw}$) – скорость сдвига (двойникового сдвига) при сдвиговом напряжении в СС (СД), равном критическому; $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига

на k -й СС, $\tau^{(k)}$ ($\tau_{nv}^{(s)}$) – касательное напряжение k -й СС (s -й СД); $\gamma_{tw}^{(s)}$ – величина двойникового сдвига; m – параметр скоростной чувствительности материала; $H(\cdot)$ – функция Хэвисайда. Следует отметить, что число СС для кристаллографических систем удваивается, что и учтено в соотношении (8). Вектор $\mathbf{b}_{nv}^{(s)}$ выбран в направлении двойникования, и двойникование возможно только при положительном касательном напряжении, вследствие чего соотношение для скорости изменения объемной доли двойников записывается в виде (9). «Раздвойникование» в данной модели не учитывается.

В дальнейшем для градиента скорости относительного движения частиц будет использоваться соотношение (4).

В качестве меры деформированного состояния кристаллита предлагается ввести меру \mathbf{q} , определяемую соотношением

$$\mathbf{q}^{cr} = \zeta_r, \quad (10)$$

где \mathbf{q}^{cr} – не зависящая от наложенного жесткого движения коротационная производная меры деформации. При рассмотрении движения с позиций подвижного наблюдателя в КСК коротационная производная трансформируется в материальную производную, тогда $\dot{\mathbf{q}} = \zeta_r = \hat{\nabla} \mathbf{v}_r^T \equiv \mathbf{v}_r \hat{\nabla}$, или $\mathbf{q} = \int_t (\mathbf{v}_r \hat{\nabla}) dt$. Следует отметить, что для подвижного наблюдателя, фиксирующего относительное движение, его базис неизменен, и операции градиента и интегрирования коммутативны: $\mathbf{q} = \left(\hat{\nabla} \int \mathbf{v}_r dt \right)^T = \hat{\nabla} \mathbf{r}^T$. Здесь \mathbf{r} – относительный радиус-вектор частиц.

Используется несимметричный закон гипопругости следующего вида:

$$\boldsymbol{\sigma}^{cr} = \mathbf{p} : \zeta_r^e, \quad (11)$$

$$\boldsymbol{\sigma}^{cr} = \mathbf{p} : (\zeta_r - \zeta_r^{in}). \quad (12)$$

Подстановка соотношения (9), связывающего меру скорости деформации мезоуровня ζ_r с транспонированным градиентом вектора скорости перемещений ζ , в (12) приводит к следующему определяющему соотношению:

$$\sigma^{cr} = \mathbf{n} : (\zeta - \zeta_r^{in} - \omega), \quad (13)$$

где σ^{cr} – не зависящая от наложенного жесткого движения производная тензора напряжений; на мезоуровне в качестве таковой используется коротационная производная с тензором спина решетки:

$$\sigma^{cr} = \dot{\sigma} + \sigma \cdot \omega - \omega \cdot \sigma; \quad (14)$$

$$\dot{\sigma} = \mathbf{n} : (\zeta - \zeta_r^{in} - \omega) - \sigma \cdot \omega + \omega \cdot \sigma. \quad (15)$$

Заметим, что при записи определяющего соотношения в базисе КСК (т.е. в терминах подвижной системы координат) коротационная производная σ^{cr} также преобразуется в материальную производную, т.е. в (15) два последних члена правой части отсутствуют.

На более высоких масштабных уровнях определение не зависящей от наложенного жесткого движения производной решается отдельно и связано с вопросом согласования определяющих соотношений различных масштабных уровней модели [6].

Тензор упругих свойств элемента мезоуровня является симметричным по парам индексов $\pi_{ijkl} = \pi_{klij}$, что следует из существования упругого потенциала. В общем случае тензор \mathbf{n} не является симметричным внутри пар индексов $\pi_{ijkl} \neq \pi_{jikl}$, $\pi_{ijkl} \neq \pi_{ijlk}$; при сравнительно малом отклонении (порядка 1 %) соответствующих компонент тензора друг от друга это приводит к заметным отличиям на диаграммах «напряжения–деформации» [3, 13].

3. Модель упруговязкопластического деформирования кристаллита

Используемые в постановке определяющие соотношения формулируются для представительного объема мезоуровня – кристаллита. Свойства материала полагаются однородными в пределах этого представительного объема. Элементами мезоуровня, как правило, выбираются кристаллиты (зерна, субзерна, фрагменты) с приблизительно правильным кристаллическим строением, анизотропными упругими свойствами, набором систем скольжения (СС) и систем двойникования (СД).

В качестве определяющего соотношения используется закон Гука (15), при этом учитывается анизотропия кристаллической решетки [14]. Система разрешающих уравнений для кристаллита в скоростях имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{n} : (\boldsymbol{\zeta}_r - \boldsymbol{\zeta}_r^{in}) + \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \\ \boldsymbol{\zeta} = \mathbf{Z}, \\ \boldsymbol{\omega} = \mathbf{w}^* - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} (\hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)} - \hat{\mathbf{n}}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}^{(k)}), \\ \mathbf{w}^* = \frac{1}{2} (\mathbf{v} \hat{\nabla} - \hat{\nabla} \mathbf{v}) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\zeta} - \boldsymbol{\zeta}^T), \\ \boldsymbol{\zeta}_r^{in} = \sum_{k=1}^K \dot{\gamma}^{(k)} \hat{\mathbf{b}}^{(k)} \hat{\mathbf{n}}^{(k)} + \sum_{s=1}^S \gamma_{tw}^{(s)} \dot{f}^{(s)} \hat{\mathbf{b}}_{tw}^{(s)} \hat{\mathbf{n}}_{tw}^{(s)}, \\ \dot{\gamma}_s^{(k)} = H(\boldsymbol{\tau}_s^{(k)} - \boldsymbol{\tau}_{sc}^{(k)}) \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\boldsymbol{\tau}_s^{(k)}}{\boldsymbol{\tau}_{sc}^{(k)}} \right)^m, \dot{f}^{(s)} = H(\boldsymbol{\tau}_{tw}^{(s)} - \boldsymbol{\tau}_{twc}^{(s)}) \frac{\dot{\gamma}_0}{\gamma_{tw}^{(s)}} \left(\frac{\boldsymbol{\tau}_{tw}^{(s)}}{\boldsymbol{\tau}_{twc}^{(s)}} \right)^m, \\ \dot{\boldsymbol{\tau}}_{sc}^{(k)} = (1-f) \sum_s h^{(ks)} |\dot{\gamma}^{(s)}| + f \sum_p h_{tw}^0 \gamma_{tw}^{(p)} \dot{f}^{(p)}, \dot{\boldsymbol{\tau}}_{twc}^{(k)} = a^{(k)} \dot{f}^{(k)} + \sum_s a^{(ks)} (1-m^{(ks)}) \dot{f}^{(s)}. \end{array} \right. \quad (16)$$

Здесь (16)₁ – закон Гука в скоростной релаксационной форме с учетом геометрической нелинейности (определяющее соотношение);

(16)₂ – гипотеза Фойгта, \mathbf{Z} – транспонированный градиент скорости перемещений (мера скорости деформации) макроуровня;

(16)₃₋₄ – соотношение модели поворота Тейлора (замыкающее уравнение);

(16)₅ – кинематическое соотношение для неупругой составляющей деформации скорости (замыкающее уравнение);

(16)₆ – упруговязкопластические соотношения для скоростей сдвига и изменения объемной доли двойников (эволюционные уравнения);

(16)₇ – соотношения для скоростей критических напряжений сопротивления сдвигу и двойникованию (эволюционное уравнение) [15, 16] введены далее.

В определяющее соотношение входят три явные внутренние переменные [11] – скорость неупругих деформаций, спин решетки и тензор упругих характеристик. К неявным внутренним переменным следует отнести скорости изменения критических напряжений сдвига

и двойникования, скорости сдвигов скольжением дислокаций и двойникованием, а также параметры, характеризующие взаимодействия скольжения и двойникования.

4. Законы упрочнения

В настоящее время одной из актуальных задач построения физических теорий пластичности является проблема описания упрочнения моно- и поликристаллов [16]. Остановимся на физических причинах, приводящих к упрочнению.

Во-первых, таковыми являются взаимодействия полных и расщепленных дислокаций, а также последних друг с другом, приводящие к образованию сидячих дислокаций (например, барьеров Ломера–Коттрелла, которые полностью перекрывают движение дислокаций по СС, в которых расположены реагирующие расщепленные дислокации). Во-вторых, существенное влияние на упрочнение оказывает наличие границ зерен в поликристаллическом агрегате. Некоторыми исследователями [17] предлагается разделение упрочнения на «неориентированное» и «ориентированное». Следует отметить, что данная классификация довольно условна, хотя и позволяет физически обосновать появление некоторых дополнительных (по отношению к общепринятым) слагаемых в законах упрочнения. Первый тип описывает упрочнение независимо от направления деформирования; речь идет о таких процессах, как образование пересечений дислокаций, жгутов, кос, барьеров Ломера–Коттрелла. Такое упрочнение приводит к увеличению критического напряжения сдвига сразу на многих системах скольжения.

«Ориентированное» упрочнение связано с накоплением упругой энергии на различных барьерах, эта энергия может высвободиться при изменении направления деформирования на реверсивное. Данный тип может быть описан за счет кинематического упрочнения либо за счет одновременного изменения критических напряжений сдвига на «противоположных» системах скольжения, т.е. на системах, имеющих один вектор нормали, но противоположные направления векторов Бюргерса.

При рассмотрении деформирования ГПУ-материалов упрочнение для кристаллита целесообразно ввести отдельно для анализируемых мод деформирования. Упрочнение для систем скольжения определяет-

ся взаимодействием дислокаций друг с другом, что сводится к взаимодействию типа сдвиг–сдвиг, и взаимодействием дислокаций с двойниками – взаимодействие типа двойникование–сдвиг.

Рассмотрим взаимодействие типа сдвиг–сдвиг. При сдвиге плотность дислокаций в активных системах скольжения увеличивается, они взаимодействуют друг с другом и с дислокациями «леса», что приводит к увеличению критического напряжения сдвига $\tau_{sc}^{(k)}$. Такое упрочнение называют деформационным. Следует отметить, что увеличение критического напряжения наблюдается и в других системах скольжения (в том числе – неактивных в данный момент процесса). Такое упрочнение называется скрытым (латентным) упрочнением.

Взаимодействие типа двойникование–сдвиг: двойники являются эффективными препятствиями для движения дислокаций, их появление приводит к скоплению и торможению дислокаций на границах двойников. Прослойки, образованные двойниками одной и той же СД, будут являться эффективным препятствием для скольжения краевых дислокаций по пересекающим эту систему двойникования системам скольжения. Необходимо отметить, что плоскости скольжения и двойникования для ГПУ-кристаллов не компланарны.

Для описания упрочнения СС за счет обоих механизмов можно использовать следующее эволюционное соотношение для сопротивления сдвигу:

$$\dot{\tau}_{sc}^{(k)} = (1-f) \sum_s h^{(ks)} \left| \dot{\gamma}^{(s)} \right| + f \sum_p h_{tw}^{(kp)} \gamma_{tw}^{(p)} \dot{f}^{(p)}, \quad \tau_{sc}^{(k)}(0) = \tau_{sc0}^{(k)}. \quad (17)$$

Здесь $\dot{f}^{(p)}$ – объемная доля двойников по p -й системе двойникования; f – накопленная объемная доля двойников по всем СД; $h_{tw}^{(p)}$ – модули упрочнения, которые отражают взаимодействие двойникование–сдвиг, для всех p принимаются одинаковыми и равными h_{tw}^0 ; $h^{(ks)}$ – матрица упрочнения, которая отражает взаимодействия сдвиг–сдвиг между системами скольжения k и s , может быть определена следующим образом [18]:

$$h^{(ks)} = \left[q + (1-q) \delta^{(ks)} \right] h^{(s)}, \quad \sum_s \neq, \quad (18)$$

где q – параметр латентного упрочнения, который в общем случае отличен от нуля; $h^{(s)}$ – параметр, характеризующий деформационное (активное) упрочнение, определяемое следующим соотношением [19]:

$$h^{(s)} = h_0^{(s)} \left(\frac{h_0^{(s)} \gamma^{(s)}}{\tau_{sc0}^{(s)} n} + 1 \right)^{n-1}, \quad (19)$$

где $h_0^{(s)}$ – параметр активного упрочнения при нулевом накопленном сдвиге в СС s ; $\gamma^{(s)}$ – накопленный сдвиг в системе скольжения s ; $\tau_{sc0}^{(k)}$ – начальное критическое напряжение s -й СС; n – показатель степенного закона упрочнения, $n \leq 1$.

Отметим, что первое слагаемое соотношения (17) учитывает взаимодействие дислокаций, второе слагаемое отражает вклад двойников в упрочнение систем скольжения за счет торможения краевых дислокаций границами двойников. Активное и латентное упрочнение учитываются с помощью матрицы модулей упрочнения (17).

Упрочнение для систем двойникования определяется влиянием дислокаций и двойников на развитие двойников, что приводит к взаимодействию сдвиг–двойникование и двойникование–двойникование соответственно. Отметим, что сдвиги оказывают малое влияние на развитие двойника, поэтому этим влиянием можно пренебречь. Эволюционное уравнение для критического напряжения s -й СД $\tau_{twc}^{(k)}$ тогда можно описать соотношением

$$\dot{\tau}_{twc}^{(k)} = a^{(k)} \dot{f}^{(k)} + \sum_s a^{(ks)} (1 - m^{(ks)}) \dot{f}^{(s)}, \quad \tau_{twc}^{(k)}(0) = \tau_{twc0}^{(k)}, \quad (20)$$

$$m^{(ks)} = \mathbf{m}_{tw}^{(k)} : \mathbf{m}_{tw}^{(s)T},$$

где $a^{(k)}, a^{(ks)}$ – модули упрочнения; m^{ks} – параметр разориентации СД, который учитывает все возможные случаи расположения СД (равен 0 при взаимно перпендикулярных плоскостях и направлениях двойникования и 1 – при их параллельности). Введение данного множителя позволяет учитывать геометрию процесса двойникования в законах упрочнения. В записи закона упрочнения для СД заметна аналогия с видом закона упрочнения для СС: первое слагаемое отражает активное

упрочнение, а второе – латентное. Ранее сформировавшиеся двойники будут повышать критические напряжения на СД, которые они пересекают.

5. Результаты

Целью численных экспериментов являлось исследование модели мезоуровня материала с низкой симметрией решетки, в частности влияние несимметрии мер напряжений, скоростей деформаций и упругих свойств на характер деформирования (сдвиги по системам скольжения, объемная доля двойников, упрочнение). При моделировании рассматриваются небольшие степени деформации, в связи с чем пренебрегают ротациями решетки.

Проведена серия численных экспериментов на простой сдвиг (в различных плоскостях) монокристаллических образцов. Все расчеты проводились при идентичных значениях параметров модели (за исключением некоторых выделенных компонент тензоров упругих свойств).

В численных экспериментах расчеты проводились для двух различных вариантов значений параметров: симметричные меры НДС и тензор упругих свойств кристаллита, а также несимметричные меры НДС и тензор упругих свойств кристаллита (рассматривалось отклонение выделенных компонент тензора упругих характеристик от их среднего значения на 1, 2 и 5 %). Ниже приведены значения независимых модулей тензора упругих свойств. В силу того, что в несимметричном случае тензор модулей упругости симметричен только по парам индексов и плоскость Ox_1x_2 является изотропной, рассматривались отклонения друг от друга компонент c_{1313} , c_{1331} , c_{2323} и c_{2332} . Будем использовать следующие обозначения вычислительных экспериментов: эксперимент №1с – деформирование скольжением и двойникованием, упрочнение отсутствует, симметричный случай; эксперимент №1н/с – деформирование скольжением и двойникованием, упрочнение отсутствует, несимметричный случай; эксперименты №2с, №2н/с – деформирование с учетом упрочнения, симметричный и несимметричный случай соответственно. Во всех вычислительных экспериментах в качестве моделируемого материала принимался монокристалл альфа-титана. На рис. 2 представлены схемы нагружения кристаллита. В табл. 3 приведены значения начальных напряжений СС и СД.

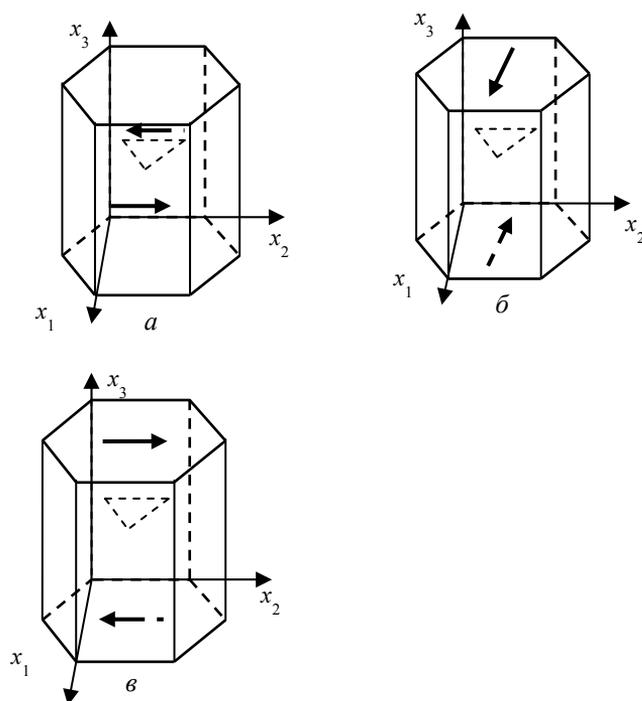


Рис. 2. Схемы нагружения кристаллитов в численном эксперименте на простой сдвиг в плоскости Ox_1x_2 (а), в плоскости Ox_1x_3 (б) и в плоскости Ox_2x_3 (в)

Независимые компоненты тензора модулей упругости:

$$c_{1111} = 16,24 \cdot 10^4 \text{ МПа}, c_{3333} = 18,07 \cdot 10^4 \text{ МПа}, c_{1122} = 9,2 \cdot 10^4 \text{ МПа},$$

$$c_{1133} = 6,9 \cdot 10^4 \text{ МПа}, c_{1313} = 4,67 \cdot 10^4 \text{ МПа}.$$

Численные эксперименты проводились при следующих параметрах модели [9]:

$$\dot{\gamma}_0 = 10^{-4} \text{ с}^{-1}, m = 50,$$

$$\gamma_{nv} = 0,218 \text{ (для двойников сжатия)},$$

$$\gamma_{nv} = 0,175 \text{ (для двойников растяжения)}.$$

Параметры законов упрочнения: $q = 1,4; n = 0,53$.

Модули $a^{(k)}, a^{(ks)}$ полагались близкими значениям тангенса угла наклона касательной к кривой касательное напряжение–сдвиг.

Таблица 3

Начальные критические напряжения СС и СД

	СС			СД	
Плоскость/ направление	$\{0001\}\langle 1\bar{1}20 \rangle$	$\{10\bar{1}0\}\langle 11\bar{2}0 \rangle$	$\{10\bar{1}\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$	$\{11\bar{2}2\}\langle 11\bar{2}3 \rangle$	$\{10\bar{1}2\}\langle i011 \rangle$
Параметр	$\tau_{sc0}^{(k)}$	$\tau_{sc0}^{(k)}$	$\tau_{sc0}^{(k)}$	$\tau_{twc0}^{(s)}$	$\tau_{twc0}^{(s)}$
Значение	150 МПа	30 МПа	120 МПа	125 МПа	125 МПа

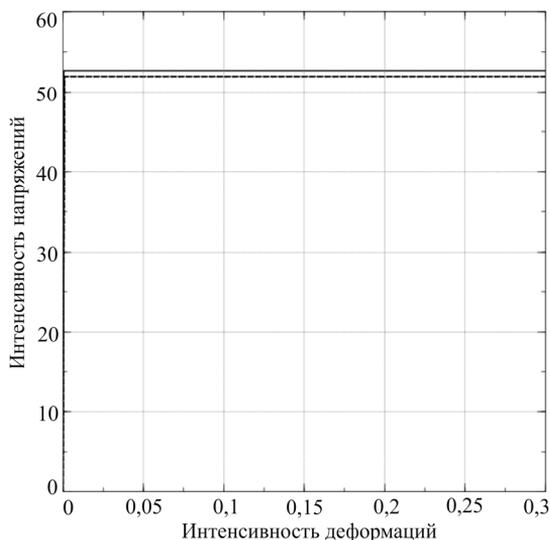


Рис. 3. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_2 без учета упрочнения, №1с; №1н/с (1, 2, 5 %); (обозначения здесь и далее соответствуют приведенным в подрисуюночной подписи к рис. 4)

На рис. 3 сплошной линией показана зависимость для случая симметричных мер НДС. Различий между экспериментами №1н/с (1 %), №1н/с(2 %) и №1н/с(5 %) для случая несимметричных мер не выявлено; отличия результатов между симметричным и несимметричным вариантами при данной ориентации кристалла незначительны. В симметричном и несимметричном случаях активными являются призматические системы скольжения (СС).

При простом сдвиге вдоль плоскости Ox_1x_3 в симметричном и несимметричном случаях (рис. 4) активными являются базисные системы скольжения (2 СС) и двойники сжатия (2 СД).

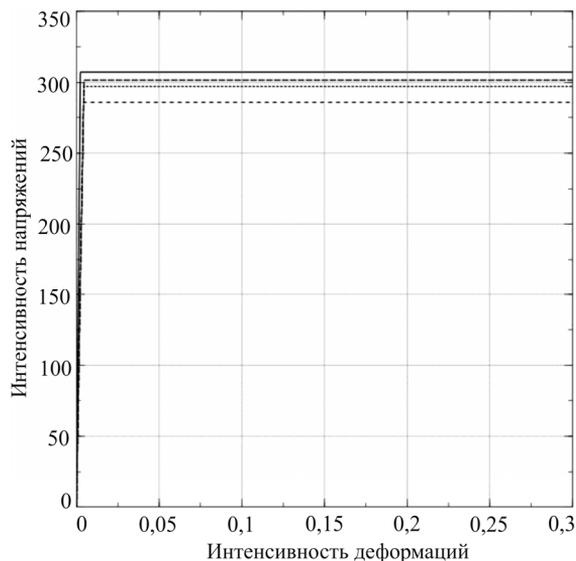


Рис. 4. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_3 без учета упрочнения, №1с (сплошная), №1н/с (— 1 %, — — — 2 %, - · - · - 5 %)

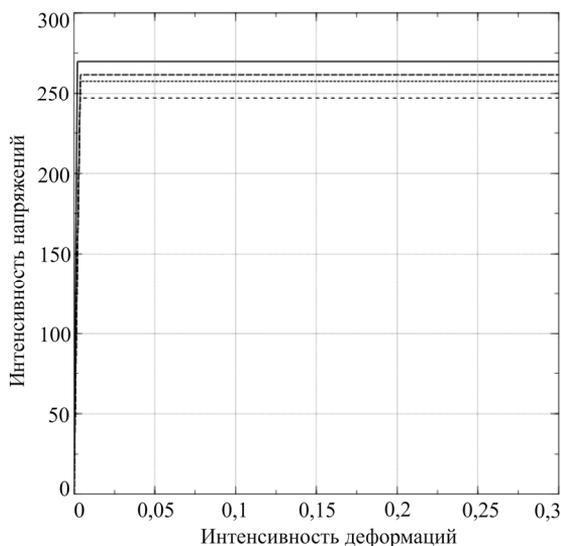


Рис. 5. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_2x_3 без учета упрочнения

При простом сдвиге вдоль плоскости Ox_2x_3 в симметричном и несимметричном случаях (рис. 5) активными являются базисные системы скольжения (1 СС) и двойники сжатия (1 СД).

На рис. 6 представлены результаты численных экспериментов № 2с и № 2н/с (1, 2, 5 %) при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_2 . Различий между экспериментами № 2н/с (1 %), № 2н/с (2 %) и № 2н/с (5 %) не выявлено.

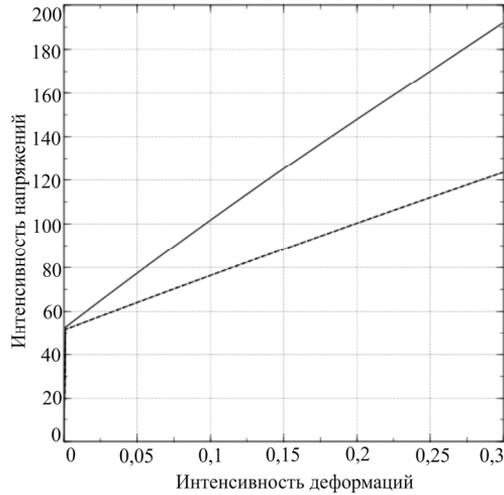


Рис. 6. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_2 с учетом упрочнения

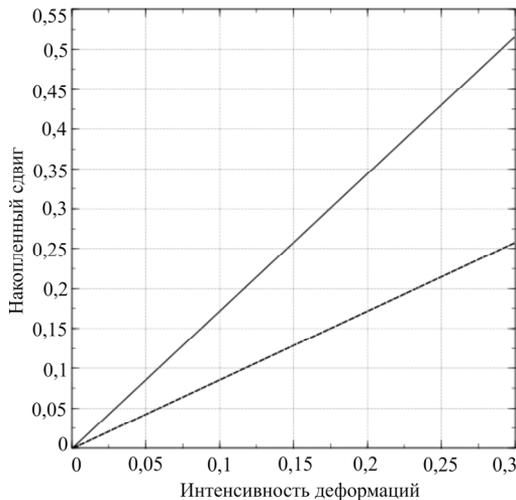


Рис. 7. Зависимость накопленного сдвига от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_2 с учетом упрочнения

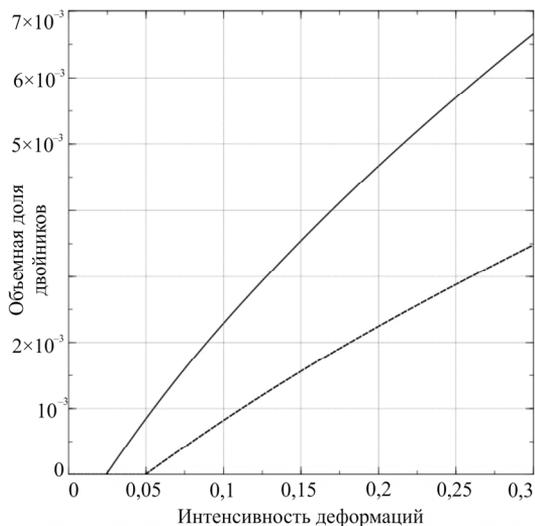


Рис. 8. Зависимость объемной доли двойников от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_2 с учетом упрочнения

На рис. 7, 8 представлены зависимости накопленного сдвига и объемной доли двойников от интенсивности деформаций соответственно (эксперимент № 2с и № 2н/с (1, 2, 5 %)). Активной является призматическая плоскость скольжения (1 СС) и двойники сжатия (2 СД).

На рис. 9 представлены результаты численных экспериментов № 2с и № 2н/с (1, 2, 5 %) при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_3 .

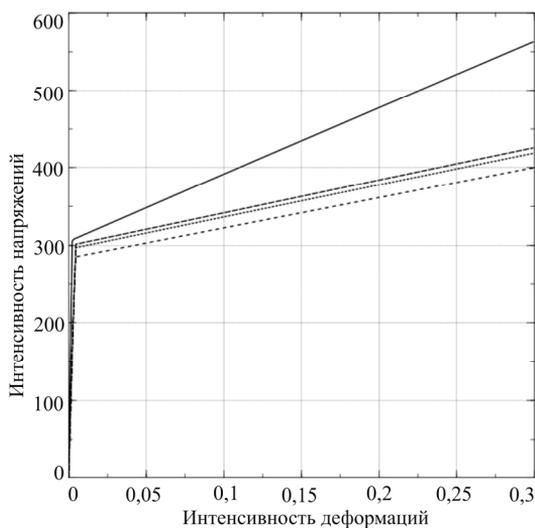


Рис. 9. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_3 с учетом упрочнения

На рис. 10, 11 представлены зависимости накопленного сдвига и объемной доли двойников от интенсивности деформаций соответственно (эксперимент № 2с и № 2н/с (1, 2, 5 %)). Активными являются базисные плоскости скольжения (2 СС) и двойники сжатия (2 СД).

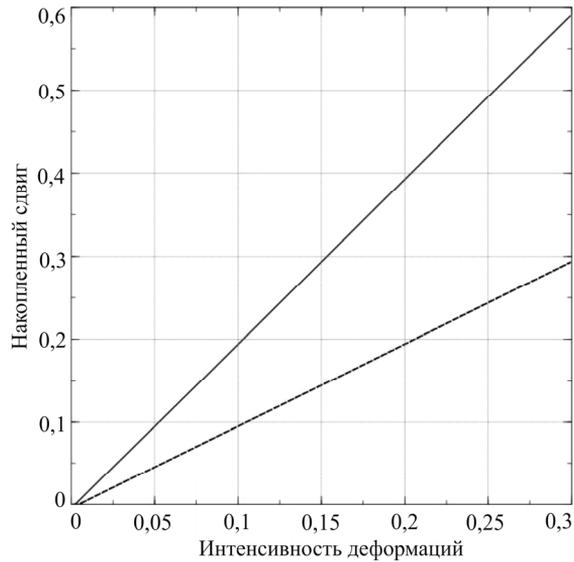


Рис. 10. Зависимость накопленного сдвига от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_3 с учетом упрочнения

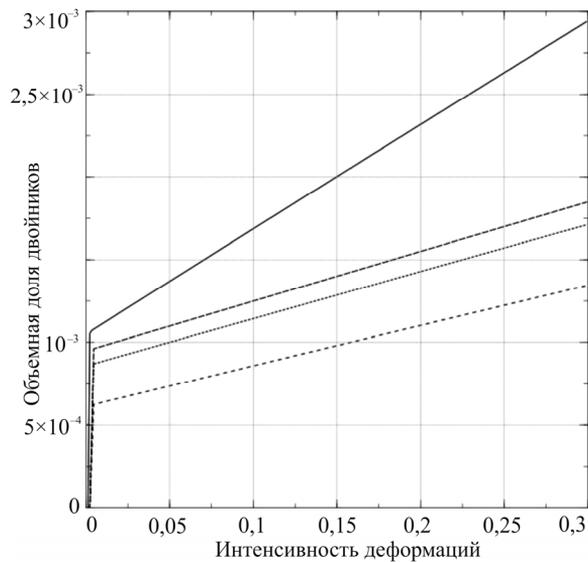


Рис. 11. Зависимость объемной доли двойников от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_1x_3 с учетом упрочнения

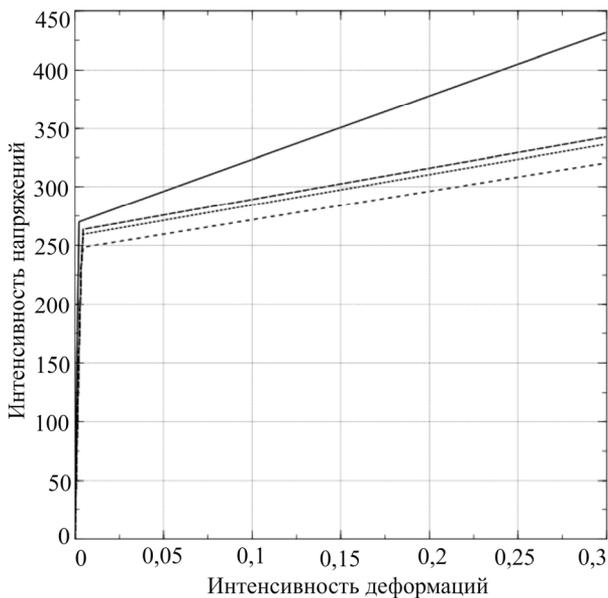


Рис. 12. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_2x_3 с учетом упрочнения

На рис. 12 представлены результаты численных экспериментов № 2с и № 2н/с(1, 2, 5 %) при простом сдвиге в плоскости Ox_2x_3 .

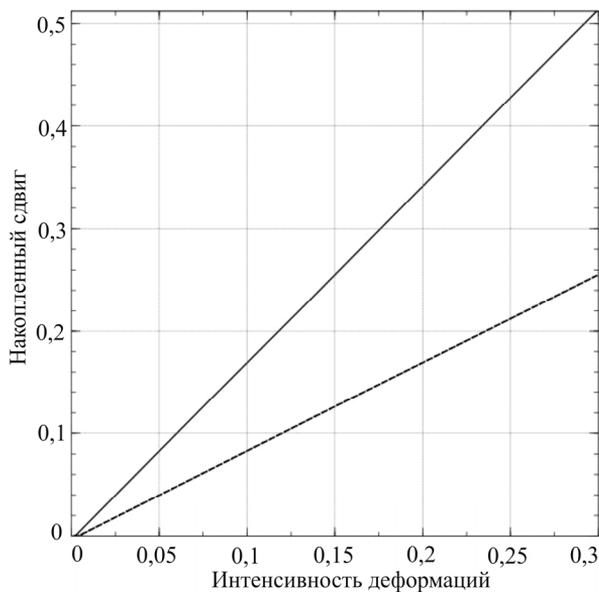


Рис. 13. Зависимость накопленного сдвига от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_2x_3 с учетом упрочнения

На рис. 13 и 14 представлены зависимости накопленного сдвига и объемной доли двойников от интенсивности деформаций соответственно (эксперимент № 2с и № 2н/с (1, 2, 5 %)). Активными являются базисные плоскости скольжения (1 СС) и двойники сжатия (1 СД).

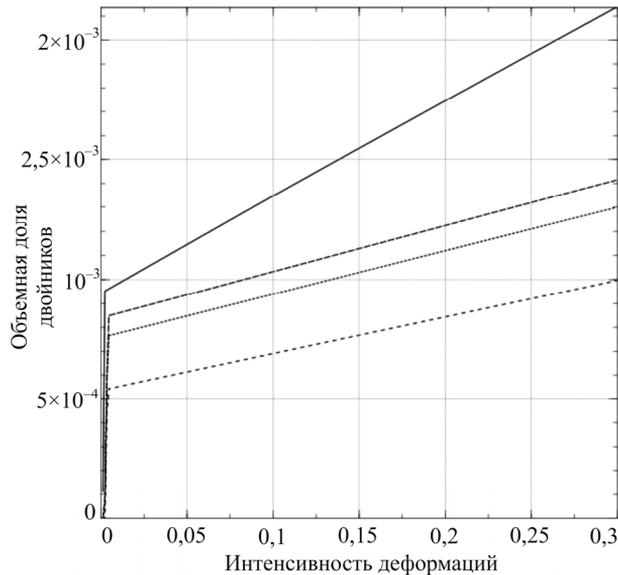


Рис. 14. Зависимость объемной доли двойников от интенсивности деформаций при простом сдвиге в плоскости Ox_2x_3 с учетом упрочнения

Численные эксперименты показали существенные отличия результатов расчетов при идентичном нагружении, которые демонстрирует модель для симметричного и несимметричного случаев. Эти отличия проявляются как в зависимости напряжений от деформаций, так и в величинах накопленного сдвига по СС и объемной доли двойников. При использовании несимметричной меры скоростей деформаций и напряжений в процессе неупругого деформирования на мезоуровне число степеней свободы системы увеличивается. В связи с этим скорость прохождения тех или иных процессов в материале меняется (в том числе – упрочнение по СС и СД). Данный факт объясняет различия между результатами модели, упомянутыми выше.

Заключение

В работе предложена модификация упруговязкопластической модели ГПУ-кристалла на примере α -титана. При уменьшении скоростной чувствительности такая модель может работать и как упруго-

пластическая. Использование именно упруговязкопластической модели позволяет избежать проблемы, существующей в упругопластических моделях, а именно – неединственности определения скоростей сдвигов.

В работе рассматривается применение несимметричных мер напряженного и деформированного состояния на мезоуровне при построении конститутивных моделей неупругого деформирования материалов. Вводится несимметричная мера скорости деформации, не зависящая от выбора системы отсчета, описывается структура модели неупругого деформирования материала, в которой использованы предложенные меры напряжений и деформаций на мезоуровне [4].

Модель учитывает такие механизмы пластического деформирования, как скольжение дислокаций и двойникование. Предложенный вариант закона упрочнения позволяет получить результаты, физически соответствующие действительности: в ГПУ-кристаллах двойникование осуществляется быстро, затем приостанавливается, так как двойники одних систем препятствуют распространению двойников других систем.

Результаты моделирования показывают, что использование несимметричных мер НДС и тензора упругих свойств существенно влияет на процесс деформирования кристаллита, что находит свое отражение как на интегральной кривой зависимости интенсивности напряжений от накопленных деформаций, так и в количественных мерах скольжения дислокаций и двойникования. Эти изменения поведения материала при деформировании наиболее заметны при рассмотрении результатов экспериментов с учетом упрочнения. Таким образом, возможная несимметричность тензора упругих свойств кристаллита и использование несимметричных мер НДС вносят весьма существенные изменения в результаты решения задачи.

Исходя из этого при построении моделей, основанных на физических теориях пластичности, для материалов с низкой симметрией на уровне кристаллитов целесообразно использовать именно несимметричные меры напряженно-деформированного состояния.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект №13-01-96006-урал_a), а также с использованием результатов работ по гранту Правительства Российской Федерации (Постановление

№ 220 от 9 апреля 2010 г.), договор № 14.В25.310006 от 24 июня 2013 года с использованием результатов работ по гранту Правительства Российской Федерации (Постановление № 220 от 9 апреля 2010 г.), договор № 14.В25.310006 от 24 июня 2013 года.

Библиографический список

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 17–28.

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

3. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности для описания эволюции микроструктуры поликристаллов // Физическая мезомеханика. – 2011. – Т. 14, № 1. – С. 19–31.

4. Трусов П.В., Нечаева Е.С., Швейкин А.И. Применение несимметричных мер напряженного и деформированного состояния при построении многоуровневых конститутивных моделей материалов // Физическая мезомеханика. – 2013. – Т. 16, № 2. – С. 15–31.

5. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия, 1986. – 224 с.

6. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры / П.В. Трусов, А.И. Швейкин, Е.С. Нечаева, П.С. Волегов // Физическая мезомеханика. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 33–56.

7. 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.

8. Головин С.А. Физические основы пластической деформации: учеб. пособие. – Тула: Изд-во Тул. гос. ун-та, 2003. – 147 с.

9. Modeling anisotropic stress-strain response and crystallographic texture evolution on α -titanium during large plastic deformation using Taylor-type models: influence of initial texture and purity / X. Wu, S.R. Kalidindi, C. Necker, A.A. Salem // Metallurgical and materials transactions. – 2008. – Vol. 39A. – P. 3046–3054.

10. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.

11. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности: учеб. пособие. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та. 2011. 419 с.
12. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
13. Волегов П.С., Шулепов А.В. Упругие константы монокристалла в несимметричной физической теории пластичности // Вестник Перм. гос. техн. ун-та. Механика. – 2010. – № 1. – С. 19–34.
14. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории пластичности // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, № 3. – С. 21–30.
15. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Упруговязкопластическая модель для описания деформирования ОЦК-монокристаллов, учитывающая двойникование // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011. – Т. 4, № 4. – С. 20–33.
16. Моделирование эволюции структуры поликристаллических материалов при упругопластическом деформировании / П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, А.И. Швейкин // Ученые записки Казан. ун-та. Сер. Физико-математические науки. – 2010. – Т. 152, № 4. – С. 225–237.
17. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3: Теории упрочнения, градиентные теории // Вестник Перм. нац. исслед. политехн. ун-та. Механика. – 2011. – № 3. – С. 146–197.
18. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // Acta Metall. – 1985. – Vol. 33, no. 6. – P. 923–953.
19. Inal K., Neale K.W. High performance computational modelling of microstructural phenomena in polycrystalline metals // Mechanics & Construction. – 2006. – Vol. 140. – No. 5. – P. 583–593.

References

1. Trusov P.V., Shvejkin A.I. Mnogourovnevye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Prjamyje modeli [Multilevel physical models of single and polycrystals. Direct models]. *Physical Mesomechanics*, 2011, vol. 14, no. 5, pp. 5–30.

2. Trusov P.V., Shvejkin A.I. Mnogourovnevye fizicheskie modeli mono- i polikristallov. Statisticheskie modeli [Multilevel physical models of single- and polycrystals. Statistical models]. *Physical Mesomechaniks*, 2011, vol. 14, no. 4, pp. 17-28.

3. Trusov P.V., Volegov P.S., Janc A.Ju. Nesimmetrichnaya fizicheskaya teoriya plastichno-sti dlya opisaniya evolyutsii mikrostruktury polikristallov [Asymmetrical physical plasticity theory to describe the evolution of the microstructure of polycrystalline]. *Physical Mesomechaniks*, 2011, vol. 14, no. 1, pp. 19-31.

4. Trusov P.V., Nechaeva E.S., Shvejkin A.I. Primeneniye nesimmetrichnykh mer naprya-zhennogo i deformirovannogo sostoyaniya pri postroyenii mnogourovnevnykh konstitutivnykh modeley materialov [Non-symmetric stress-strain measures using when construct multilevel constitutive material models]. *Physical Mesomechaniks*, 2013, vol. 16, no. 2, pp. 15-31.

5. Rybin V.V. Bol'shiye plasticheskiye deformatsii i razrusheniye metallov [Large plastic deformation and fracture of metals]. Moscow: Metallurgiya, 1986. P. 224.

6. Trusov P.V., Shvejkin A.I., Nechaeva E.S., Volegov P.S. Mnogourovnevyye modeli ne-uprugogo deformirovaniya materialov i ikh primeneniye dlya opisaniya evolyutsii vnut-renney struktury [Multilevel model of inelastic deformation of materials and their application for description of internal structure evolution]. *Physical Mesomechaniks*, 2012, vol. 15, no. 1, pp. 33-56.

7. Trusov P.V., Ashihmin V.N., Shvejkin A.I. Dvuhurovnevaya model' uprugoplasticheskogo deformirovaniya polikristallicheskih materialov [Two-level model of elastic-plastic deformation of polycrystalline materials]. *Mekhanika kompozitsionnykh materialov i konstruksiy*, 2009, vol. 15, no. 3, pp. 327-344.

8. Golovin S.A. Fizicheskiye osnovy plasticheskoy deformatsii: ucheb. posobiye [Physical basis of plastic deformation: studies. allowance]. Tul'skiy gosudarstvenniy universitet, 2003. P. 147.

9. Wu X., Kalidindi S.R., Necker C., Salem A.A. Modeling anisotropic stress-strain response and crystallographic texture evolution on α -titanium during large plastic deformation using Taylor-type models: influence of initial texture and purity. *Metallurgical and materials transactions*, 2008, vol. 39A, pp. 3046-3054.

10. Hirt D., Lote I. Theory of Dislocations [Teoriya dislokacij]. Moscow: Atomizdat, 1972. P. 600.

11. Trusov P.V., Shvejkin A.I. Teoria plastichnosti [Crystal plasticity]. Permskiy natsionalniy issledovatel'skiy polytekhnikskiy universitet, 2011. P. 419.

12. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Niashin Y.I. Bol'shiye uprugoplasticheskiye deformatsii: teoriya, algoritmy, prilozheniya [Large elastoplastic deformation: theory, algorithms, and applications]. Moscow: Nauka, 1986. P. 232.

13. Volegov P.S., Shulepov A.V. Uprugiye konstanty monokristalla v nesimmetrichnoy fizicheskoy teorii plastichnosti [The elastic constants of a single crystal in the asymmetric the physical theory of plasticity]. *Vestnik Permskogo gosudarstvennogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika*, 2010, no. 1, pp. 19-34.

14. Trusov P.V., Ashihmin V.N., Shvejkin A.I. Analiz deformirovaniya GTSK-metallov s ispol'zovaniyem fizicheskoy teorii plastichnosti [Analysis of deformation of fcc metals using the physical theory of plasticity]. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2010, vol. 13, no. 3, pp. 21-30.

15. Kondrat'yev N.S., Trusov P.V. Uprugoviyazkoplasticheskaya model' dlya opisaniya defor-mirovaniya OTSK-monokristallov, uchityvayushchaya dvoynikovaniye [Elastoviscoplastic model to describe the deformation of bcc crystals, taking into account the twinning]. *Vychislitel'naya mekhanika sploshnykh sred*, 2011, vol. 4, no. 4, pp. 20-33.

16. Trusov P.V., Volegov P.S., Shvejkin A.I. Konstitutivnaya uprugoviyazkoplasticheskaya model' GTSK-polikristallov: teoriya, algoritmy prilozheniya [Elastoviscoplastic constitutive model fcc-polycrystals: theory, algorithms, applications]. Saarbrucken: LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH & Co. KG, 2011. P. 147.

17. Janz A.YU., Volegov P.S. Uprugoviyazkoplasticheskaya model' deformatsionnogo uprochneniya polikristallicheskogo agregata: uchet zernogranichnogo uprochneniya [Elastoviscoplastic model hardening polycrystalline aggregate: consideration of grain boundary hardening]. *Sbornik nauchnykh trudov: «Molodezhnaya nauka Prikamya»*. Vyp. 11. Permskiy gosudarstvenniy tekhnicheskii universitet, 2010, pp. 393-398.

18. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall*, 1985, vol. 33, no. 6, pp. 923-953.

19. Inal K., Neale K.W. High performance computational modelling of microstructural phenomena in polycrystalline metals. *Mechanics & Construction*, 2006, vol. 140, no. 5, pp. 583-593.

Об авторах

Мацюк Кристина Валерьевна (Пермь, Россия) – студентка кафедры математического моделирования систем и процессов Пермского национального исследовательского политехнического университета (614990, г. Пермь, Комсомольский пр., 29, e-mail: Krissss91@mail.ru).

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

About the authors

Matsyuk Kristina Valeryevna (Perm, Russian Federation) – Doctoral Student of Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, Perm National Research Polytechnic University (614990, 29, Komsomolsky av., Perm, Russian Federation, e-mail: Krissss91@mail.ru).

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

Получено 18.11.2013