



ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА

№ 4, 2019

PNRPU MECHANICS BULLETIN

<http://vestnik.pstu.ru/mechanics/about/inf/>



DOI: 10.15593/perm.mech/2019.4.17

УДК 539.3

## УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЗЕРЕН В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

А.А. Ташкинов, В.Е. Шавшуков

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Россия

### О СТАТЬЕ

Получена: 17 ноября 2019 г.  
Принята: 05 декабря 2019 г.  
Опубликована: 30 декабря 2019 г.

#### Ключевые слова:

упругопластические деформации,  
поликристаллы, интегральные  
уравнения.

### АННОТАЦИЯ

В работе развит новый метод решения краевых задач упругопластического деформирования поликристаллических материалов на основе теоретико-полевого подхода. Краевая задача для неоднородных глобальных полей деформирования в дифференциальной форме преобразуется в систему интегральных уравнений для тензоров мезодеформаций в зернах. В этом подходе деформация в любой точке какого-либо зерна поликристалла представляется в виде суперпозиции однородной макродеформации и вкладов от взаимодействий с деформациями в этом зерне и во всех остальных зернах поликристаллического тела. Показано, что эффекты взаимодействия деформаций в зернах поликристалла можно описать с помощью тензоров четвертого ранга. Для двух зерен произвольной анизотропии этот тензор имеет 36 независимых компонент. Взаимодействия носят аддитивный характер, что кардинально упрощает решение некоторых задач, например нахождение экстремальных микроструктур поликристалла, в которых зарождаются критические локализованные явления типа очагов первых пластических сдвигов. Для тела в целом и отдельных зерен используются определяющие соотношения деформационного типа. Построена модель упругопластического деформирования монокристаллов зерен. Физическими механизмами пластического деформирования являются сдвиги в системах скольжения кристаллов. Получены общие выражения для вычисления текущих модулей монокристаллов при любом многоосном деформировании. Для решения систем интегральных уравнений для мезодеформаций в зернах поликристаллов применяется теория возмущений по межзеренному взаимодействию. Нелинейные системы уравнений для пластических деформаций решаются методом итераций.

Теоретически исследованы особенности упругопластического взаимодействия зерен. Интенсивность упругопластического взаимодействия зависит от деформированного состояния зерен. Для двух одинаковых зерен упругопластическое взаимодействие пары в несколько раз интенсивнее упругого. При этом влияние пластически деформированного зерна на упругодеформированное намного выше, чем обратное влияние. Рост интенсивности взаимодействия с развитием пластических деформаций ведет к эффекту гомогенизации мезодеформаций. Вычислительные эксперименты выполнены на примере поликристаллического титана.

© ПНИПУ

© Ташкинов Анатолий Александрович – д.ф.-м.н., проф., e-mail: [tash@pstu.ru](mailto: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](mailto: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](mailto:tash@pstu.ru),  
[iD: 0000-0002-1852-166X](https://orcid.org/0000-0002-1852-166X).  
Viacheslav E. Shavshukov – CS in Physical and Mathematical Sciences, Assistant Professor,  
e-mail: [shavshukov@pstu.ru](mailto: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)

## ELASTOPLASTIC INTERACTION OF GRAINS IN POLYCRYSTALLINE MATERIALS

A.A. Tashkinov, V.E. Shavshukov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

### ARTICLE INFO

Received: 17 November 2019

Accepted: 05 December 2019

Published: 30 December 2019

#### Keywords:

elastoplastic strains, polycrystals,  
integral equations.

### ABSTRACT

A new method is developed for solving boundary value problems of elastoplastic deformation of polycrystalline materials based on the field-theoretical approach. The boundary value problem for inhomogeneous global strain fields in differential form is transformed into a system of integral equations for mesostrain tensors in grains. In this approach, strain at any point of any grain represented as a superposition of homogeneous macrostrain and contributions of interactions with strain in given grain and all another grains of polycrystalline body. It is shown that the effects of the interaction of strains in polycrystal grains can be described using tensors of the fourth rank. This tensor has 36 independent components. The interactions are additive in nature, that drastically simplifies the solution of some problems, for example, search for extreme microstructures of a polycrystal in which critical localized phenomena arise, such as nucleation of the first plastic slips occur. Constitutive equations of deformation type are used for whole body and separate grains. A model of elastoplastic deformation of single crystals of grains is constructed. The physical mechanisms of plastic deformation are shifts in slip systems of crystals. General expressions are obtained for calculating the secant modules of single crystals for any multiaxial deformation. To solve systems of integral equations for mesostrain in grains the perturbation theory upon intergrains interaction used. Nonlinear systems of equations for plastic strains are solved by the iteration method.

The features of the elastoplastic interaction of grains are theoretically investigated. The intensity of the elastoplastic interaction depends on the deformed state of the grains. For two identical grains, the elastoplastic interaction of the pair is several times more intense than the elastic one. In this case, the effect of plastically deformed grain on elastically deformed grain is much higher than the inverse effect. An increase in the intensity of interaction with the development of plastic deformations leads to the effect of homogenization of mesodeformations. Computational experiments were performed using polycrystalline titanium as an example.

© PNRPU

### Введение

Способность металлических материалов в достаточно высокой степени деформироваться пластически лежит в основе всей промышленной цивилизации. В силу большой сложности процессов пластического деформирования и многообразия физических механизмов реализации пластических деформаций первые модели их теоретического описания появились значительно позднее моделей упругого деформирования. В настоящее время сложились три основных подхода к проблеме пластического деформирования поликристаллических материалов, связанные в первую очередь с масштабными уровнями рассмотрения структуры: макроскопический (однородное тело), мезоскопический (учет размеров и структуры зерен), микроскопический (уровень отдельных дислокаций).

На макроскопическом уровне применяются чисто феноменологические континуальные теории, базирующиеся на разложении полной деформации на упругую и пластическую части. Пластическая часть оценивается из термодинамических соображений касательно диссипативных процессов в материале (принцип максимальной пластической работы Р. Хилла и т.д.). Для учета влияния зеренной структуры вводятся некоторые внутренние переменные, подлежащие идентификации. Феноме-

нологический подход использует классические модели пластичности.

При мезоскопическом рассмотрении пластические свойства поликристаллического агрегата выводятся из свойств и закономерностей пластического деформирования монокристаллов, соответствующих зернам материала. Свойства отдельного зерна и соответствующего (макроскопического) монокристалла считаются идентичными. Физическим механизмом деформирования зерна является сдвиг в определенных кристаллографических системах скольжения. Решается краевая задача деформирования поликристалла как составного тела. Большое распространение получили методы компьютерного моделирования структуры поликристаллических тел с последующим решением для них краевых задач численными методами. Для зерен-монокристаллов используются различные модели пластического деформирования. В англоязычной литературе это наиболее часто применяемый подход в исследовании пластичности поликристаллов. Соответствующее направление получило название вычислительной кристаллической пластичности (Computational Crystal Plasticity). Разработано много вариантов этого метода, опубликованы многочисленные обзоры [1–5]. Метод вычислительной кристаллической пластичности позволяет проследить эволюцию деформирования индивидуальных

зерен, что особенно важно в проблемах высокоцикло-вой и гиперцикловой усталости, где зарождение усталостных повреждений происходит в результате накопления малых пластических деформаций в отдельных зернах. Очаги повреждений возникают в специфически ориентированных зернах, окруженных характерной микроструктурой. Эти зерна получили название «мягкие зерна», а микроструктуры – название микроструктурных экстримов или экстремальных микроструктур [6, 7, 8]. Для поиска таких микроструктур применяют различные вычислительные и экспериментальные методы [9, 10, 11]. Вероятность образования экстремальных микроструктур весьма мала, но они являются причиной большого разброса усталостной долговечности [12] в режимах сверхвысокоцикловой усталости. Вычислительный поиск случайно образующихся экстремальных структур методом компьютерного моделирования практически невозможен ввиду необходимости генерировать колоссальное количество моделей.

На микроскопическом уровне используются дискретные или континуальные модели отдельных дислокаций и их взаимодействий [13]. Для связи микроскопических параметров, применяемых на этом уровне, с макроскопическим пластическим откликом вводятся дополнительные модельные соображения.

Все три вышеупомянутых подхода активно развиваются многочисленными научными школами в теории пластичности. В настоящей работе используется мезоскопический уровень рассмотрения проблемы пластического деформирования поликристаллов. Для решения краевых задач упругопластического деформирования моно- и поликристаллов развивается новый метод, основанный на теоретико-полевом подходе к проблеме деформирования неоднородных тел.

### 1. Краевая задача упругопластического деформирования поликристаллических тел в теоретико-полевой формулировке

Рассмотрим произвольное неоднородное упругопластическое тело. Пусть  $\varepsilon_{mn}(\vec{r})$  – тензор полной глобальной неоднородной деформации в теле;  $u_m(\vec{r})$  – полный неоднородный вектор перемещений. Будут рассматриваться только малые упругопластические деформаций, так что полные деформации и перемещения связаны соотношением

$$\varepsilon_{mn}(\vec{r}) = \frac{1}{2}(u_{m,n}(\vec{r}) + u_{n,m}(\vec{r})), \quad (1)$$

где  $u_{m,n}(\vec{r})$  – градиент перемещений.

Для деформаций и векторов перемещений считается справедливым аддитивное разложение на упругие и пластические части:

$$\varepsilon_{mn}(\vec{r}) = \varepsilon_{mn}^{el}(\vec{r}) + \varepsilon_{mn}^{pl}(\vec{r}), \quad (2)$$

$$u_m(\vec{r}) = u_m^{el}(\vec{r}) + u_m^{pl}(\vec{r}).$$

Будем использовать деформационную теорию пластичности. Определяющие соотношения для всего тела запишем в виде

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \tilde{C}_{ijmn}(\vec{r})\varepsilon_{mn}(\vec{r}),$$

где  $\tilde{C}_{ijmn}(\vec{r})$  – глобальный тензор секущих модулей упругости. Секущий модуль зависит не только от координат, но и от текущего значения тензора деформаций. Однако для краткости эту зависимость явно не будем указывать, но всегда подразумевать. Считаем тензор секущих модулей обладающим обычными свойствами симметрии по перестановкам индексов:

$$\tilde{C}_{ijmn}(\vec{r}) = \tilde{C}_{nmij}(\vec{r}) = \tilde{C}_{jimn}(\vec{r}) = \tilde{C}_{ijnm}(\vec{r}). \quad (3)$$

Будем рассматривать только макроскопически изотропные тела. Это означает, что осредненный по объему тела тензор  $\tilde{C}_{ijmn}(\vec{r})$

$$\frac{1}{V} \int_V \tilde{C}_{ijmn}(\vec{r}) d\vec{r} \equiv \langle \tilde{C}_{ijmn} \rangle \quad (4)$$

однороден и изотропен, то есть представим в виде

$$\langle \tilde{C}_{ijmn} \rangle = 3\langle \tilde{K} \rangle V_{ijmn} + 2\langle \tilde{\mu} \rangle D_{ijmn}, \quad (5)$$

где  $V_{ijmn}$  и  $D_{ijmn}$  – шаровая и девиаторная части единичного тензора 4-го ранга

$$I_{ijkl} = \frac{1}{2}(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}),$$

где  $\delta_{ik}$  – символ Кронекера, а  $\langle \tilde{K} \rangle$  и  $\langle \tilde{\mu} \rangle$  – осредненные по объему тела модули объемного сжатия и сдвига.

Для получения искомым уравнений теоретико-полевого подхода поставим две краевые упругопластические задачи в традиционной дифференциальной форме. Первая задача для неоднородного упругопластического тела, не обязательно поликристаллического, с кинематическими граничными условиями имеет вид

$$\sigma_{ij,j}(\vec{r}) + f_i(\vec{r}) = 0,$$

$$\sigma_{ij}(\vec{r}) = \tilde{C}_{ijmn}(\vec{r})\varepsilon_{mn}(\vec{r}), \quad (6)$$

$$u_i(\vec{r})|_{\Gamma} = \psi_i(\vec{r}).$$

Здесь  $\Gamma$  – внешняя поверхность тела;  $\psi_i(\vec{r})$  – заданные перемещения на поверхности тела.

Разлагаем тензор секущих модулей на осредненную по объему тела и флуктуирующую составляющие:

$$\tilde{C}_{ijmn}(\vec{r}) = \langle \tilde{C}_{ijmn} \rangle + \tilde{C}'_{ijmn}(\vec{r}). \quad (7)$$

Осредненный тензор  $\langle \tilde{C}_{ijmn} \rangle$  не зависит от координат, но зависит от осредненной макродеформации тела.

Осредненная макродеформация является в данном контексте внешним параметром и не затрагивает структуру уравнений (не участвует в дифференцировании по координатам). Уравнения равновесия в (6) примут вид

$$\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle u_{k,jl}(\vec{r}) + \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}) u_{k,l}(\vec{r}) \right]_{,j} + f_i(\vec{r}) = 0. \quad (8)$$

Введем функцию Грина  $\tilde{G}_{ij}(\vec{r})$  для однородного упругопластического тела с осредненным тензором текущих модулей упругости посредством уравнения

$$\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,jl}(\vec{r} - \vec{r}') + \delta_{im} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = 0. \quad (9)$$

Для большого тела за решение (9) можно взять функцию Грина для неограниченной среды, обращаясь на бесконечности в ноль. Для нахождения ее вида поступим так же, как это делается для упругой задачи [14]. Перейдем в (9) к образам Фурье-переменных по формулам

$$\tilde{G}_{im}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \bar{G}_{im}(\vec{q}) e^{i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q},$$

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int e^{i\vec{q}\vec{r}} d\vec{q}.$$

Однородный тензор  $\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle$  не зависит от координат и не подвергается Фурье-преобразованию. Для Фурье-образа функции Грина  $\bar{G}_{im}(\vec{q})$  получается уравнение

$$\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle q_j q_l \bar{G}_{km}(\vec{q}) = \delta_{im},$$

по форме совпадающее с аналогичным уравнением для функции Грина упругой задачи [14]. Поэтому для среды с однородным изотропным тензором  $\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle$  типа (5) искома функция Грина

$$\tilde{G}_{im}(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi \langle \tilde{\mu} \rangle r} \left[ (2 - \tilde{\chi}) \delta_{im} + \tilde{\chi} n_i n_m \right], \quad (10)$$

где  $n_i = \frac{x_i}{r}$  – единичный вектор вдоль направления радиуса-вектора  $\vec{r}$ , а  $\tilde{\chi} = \frac{3\langle \tilde{K} \rangle + \langle \tilde{\mu} \rangle}{3\langle \tilde{K} \rangle + 4\langle \tilde{\mu} \rangle}$  – упругопластический материальный параметр. Выражение (10) внешне совпадает с упругой функцией Грина, если в последней формально заменить средние упругие модули на текущие  $\langle K \rangle \rightarrow \langle \tilde{K} \rangle$ ,  $\langle \mu \rangle \rightarrow \langle \tilde{\mu} \rangle$ . Упругопластическая функция Грина зависит от осредненного тензора деформации как от внешнего параметра.

Производные функции Грина обладают очевидными свойствами:

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{km,jl}(\vec{r} - \vec{r}') &= \tilde{G}_{km,j'l'}(\vec{r} - \vec{r}') = -\tilde{G}_{km,j'l}(\vec{r} - \vec{r}'), \\ \tilde{G}_{km,j}(\vec{r} - \vec{r}') &= -\tilde{G}_{km,j'}(\vec{r} - \vec{r}'). \end{aligned} \quad (11)$$

Умножим уравнение (8) на  $\tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}')$  и просуммируем по  $i$ , одновременно переобозначив аргумент  $\vec{r} \rightarrow \vec{r}'$ :

$$\begin{aligned} &\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,jl}(\vec{r}') + \\ &+ \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right]_{,j} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') + f_i(\vec{r}') \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') = 0. \end{aligned}$$

Уравнение (9) умножаем на  $u_i(\vec{r}')$  и также суммируем по  $i$ :

$$\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,j'l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_i(\vec{r}') + \delta_{im} \delta(\vec{r} - \vec{r}') u_i(\vec{r}') = 0.$$

В первых членах последних двух уравнений распростируем производные по  $x'_j$  на все сомножители, вычтя соответствующие члены:

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x'_j} \left[ \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right] - \langle C_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{im,j'}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') + \\ &+ \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right]_{,j} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') + f_i(\vec{r}') \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') = 0, \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial x'_j} \left[ \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_i(\vec{r}') \right] - \\ &- \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_{i,j}(\vec{r}') + \delta(\vec{r} - \vec{r}') u_m(\vec{r}') = 0. \quad (13) \end{aligned}$$

В уравнениях (12) и (13) свободный индекс  $m$ , немые индексы (по которым производится суммирование) можно переобозначать. Сделав во вторых членах (12) и (13) замену  $ij \leftrightarrow kl$ , можно видеть, что они одинаковы. Вычитая из (12) уравнение (13) и применяя теорему Гаусса для объемного интеграла от первых членов (с дивергенциями), получим

$$\begin{aligned} u_m(\vec{r}) &= \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \oint_{\Gamma} \left[ \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') - \tilde{G}_{km,l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_i(\vec{r}') \right] \times \\ &\times dS_{j'} + \int_V \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right]_{,j} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}' + \\ &+ \int_V f_i(\vec{r}') \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \quad (14) \end{aligned}$$

Уравнение (14) есть интегродифференциальное уравнение для глобального вектора перемещений  $u_m(\vec{r})$  в рамках деформационной модели пластичности неоднородного тела.

Вторая краевая задача ставится для однородного упругопластического тела с осредненным тензором текущих модулей. Вектор перемещений для этого тела отметим звездочкой  $u_m^*(\vec{r})$ .

Уравнения равновесия в перемещениях и граничные условия для этого тела

$$\begin{aligned} \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle u_{k,jl}^*(\vec{r}) + f_i(\vec{r}) &= 0, \\ u_i^*(\vec{r}) \Big|_{\Gamma} &= \varphi_i(\vec{r}), \end{aligned} \quad (15)$$

где  $\varphi_i(\vec{r})$  – заданные перемещения на поверхности тела для второй задачи.

Вводим для этой задачи функцию Грина, совпадающую с функцией Грина в уравнении (9):

$$\langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,jl}(\vec{r} - \vec{r}') + \delta_{im} \delta(\vec{r} - \vec{r}') = 0. \quad (16)$$

Умножаем (15) на  $\tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}')$ , а (16) на  $u_i^*(\vec{r}')$ :

$$\begin{aligned} \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,jl}^*(\vec{r}') + f_i(\vec{r}') \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') &= 0, \\ \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,jl}(\vec{r} - \vec{r}') u_i^*(\vec{r}') + \delta_{im} \delta(\vec{r} - \vec{r}') u_i^*(\vec{r}') &= 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Перепишем систему (17), комбинируя производные:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[ \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,l}^*(\vec{r}') \right] - \\ - \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{im,j'}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,l}^*(\vec{r}') + f_i(\vec{r}') \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') = 0, \end{aligned} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[ \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_i^*(\vec{r}') \right] - \\ - \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \tilde{G}_{km,l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_i^*(\vec{r}') + \delta(\vec{r} - \vec{r}') u_m^*(\vec{r}') = 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Снова замечаем, что вторые члены в уравнениях (18) и (19) одинаковы. Вычитаем из уравнения (18) уравнение (19), интегрируем по  $\vec{r}'$  по объему тела, применяем теорему Гаусса для членов с дивергенциями и получаем интегродифференциальное уравнение для перемещений в однородном теле

$$\begin{aligned} u_m^*(\vec{r}) = \langle \tilde{C}_{ijkl} \rangle \oint_{\Gamma} \left[ \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') u_{k,l}^*(\vec{r}') - \tilde{G}_{km,l'}(\vec{r} - \vec{r}') u_i^*(\vec{r}') \right] \times \\ \times dS_{j'} + \int_V f_i(\vec{r}') \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (20)$$

Если выбрать граничные условия для уравнений равновесия (8) и (15) обеих задач одинаковыми, то поверхностные интегралы в интегродифференциальных уравнениях (14) и (20) совпадают. Вычитая одно уравнение из другого получаем

$$u_m(\vec{r}) = u_m^*(\vec{r}) + \int_V \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right]_{,j'} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \quad (21)$$

Это интегродифференциальное уравнение для полного вектора перемещений  $u_m(\vec{r})$  в неоднородном упругопластическом теле. Влияние граничных условий на решение перенесено в задачу для перемещений  $u_m^*(\vec{r})$  в однородном теле. Решение однородной задачи можно считать известным (это классическая задача деформационной теории пластичности однородного тела). При этом само решение  $u_m^*(\vec{r})$  может быть неоднородным. Таким образом, как и в упругой задаче [15], уравнение (21) разделяет влияние на решение граничных условий и неоднородностей тела.

Дифференцированием (21) по  $\vec{r}$  переходим к градиентам перемещений:

$$u_{m,n}(\vec{r}) = u_{m,n}^*(\vec{r}) +$$

$$+ \int_V \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \right] \cdot \frac{\partial}{\partial x_n} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \quad (22)$$

Уравнение (22) неудобно тем, что содержит (в случае микронеоднородных тел, например поликристаллов) производную от быстроосциллирующих или даже разрывных функций  $\tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}')$ . Чтобы уйти от этих производных, применим прием, впервые использованный И.М. Лифшицем в статье 1946 г. [16]. Заменяем функции  $\tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}')$  пробными, совпадающими с исходными везде, кроме узких областей вблизи границ зерен, где пробные функции непрерывны и дифференцируемы, что устраняет неопределенности с производными. Вносим  $\frac{\partial}{\partial x_n} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}')$  под знак первой производной (чтобы получить полную дивергенцию) и одновременно вычитаем соответствующее выражение:

$$\begin{aligned} u_{m,n}(\vec{r}) = u_{m,n}^*(\vec{r}) + \\ + \int_V \frac{\partial}{\partial x'_j} \left[ \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \cdot \frac{\partial}{\partial x_n} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') \right] d\vec{r}' - \\ - \int_V \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \cdot \frac{\partial^2}{\partial x'_j \partial x_n} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (23)$$

В последней производной в (23) замечаем, что  $\frac{\partial^2}{\partial x'_j \partial x_n} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}') = -\frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_n} \tilde{G}_{im}(\vec{r} - \vec{r}')$ . Преобразуя первый объемный интеграл в поверхностный, получаем еще одну форму интегрального уравнения:

$$\begin{aligned} u_{m,n}(\vec{r}) = u_{m,n}^*(\vec{r}) + \oint_{\Gamma} \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \cdot \tilde{G}_{im,n}(\vec{r} - \vec{r}') dS'_{j'} + \\ + \int_V \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \cdot \tilde{G}_{im,jn}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \end{aligned} \quad (24)$$

Уравнение (24) не содержит производных от разрывных функций, и в нем можно вернуться к исходным быстроосциллирующим и разрывным функциям  $\tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}')$ . Уравнение (24) предпочтительнее для микронеоднородных тел. Для них в поверхностном интеграле стоит произведение быстроосциллирующей около нуля функции  $\tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}')$  на гладкие функции. Поэтому по любому достаточно большому участку поверхности тела (для поликристалла много больше площади сечения зерна), а значит, и для всего тела интеграл обращается в ноль.

Получаем искомое точно для больших поликристаллических (или микронеоднородных) тел уравнение для градиентов деформаций

$$u_{m,n}(\vec{r}) = u_{m,n}^*(\vec{r}) + \int_V \tilde{C}'_{ijkl}(\vec{r}') u_{k,l}(\vec{r}') \cdot \tilde{G}_{im,jn}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}'. \quad (25)$$

Уравнение (25) отличается от соответствующего уравнения для упругого случая [15] формальной заме-



поправки в (33) становятся постоянными числами, и для них получается система алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} [I_{ijkl} - \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(0)(\xi)} &= \epsilon_{ij}^*, \\ [I_{ijkl} - \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(1)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(0)(\eta)}, \\ [I_{ijkl} - \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(2)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(1)(\eta)}, \\ [I_{ijkl} - \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}] \epsilon_{kl}^{(3)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(2)(\eta)}, \\ &\dots \text{ и т.д.,} \end{aligned} \quad (34)$$

где

$$\tilde{B}_{ijmn}^{(\xi\eta)} \equiv \int_{\omega_\eta} d\vec{r}' \tilde{g}_{ijkl}(\vec{r}'_\xi - \vec{r}'_\eta) (\tilde{C}_{klmn}^{(\eta)} - \langle \tilde{C}_{klmn} \rangle) - \quad (35)$$

тензорные коэффициенты, зависящие от конфигурации структуры поликристалла.

Микроструктура поликристалла задается совокупностью коэффициентов  $\tilde{B}_{ijmn}^{(\xi\eta)}$ . Каждая строка в (34) есть в действительности подсистема из шести уравнений.

Введем новый тензор, обратный тензорному выражению в квадратных скобках в (34),

$$\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\xi)} \equiv [I_{ijkl} - \tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}]^{-1}. \quad (36)$$

Вычислительные эксперименты с зернами-монокристаллами различных сингоний и всевозможных случайных ориентаций кристаллографических осей зерен в поликристалле (от этого зависят коэффициенты  $\tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}$ ) показали, что такое обращение всегда возможно. Для практических вычислений система (34), тензор (36) и аналогичные выражения ниже записываются в матричном виде. Например, тензоры  $\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\xi)}$  и  $\tilde{B}_{ijkl}^{(\xi\xi)}$  заменяются на квадратные матрицы  $\tilde{A}_{pq}^{(\xi\xi)}$  и  $\tilde{B}_{pq}^{(\xi\xi)}$  размерностью 9x9. Используя симметрию введенных тензоров по перестановке индексов первой и второй пары, можно сократить ранг матриц до 6x6. Матричные операции выполняются численно с помощью стандартных современных пакетов программ для решения задач линейной алгебры.

С введением тензоров (36) система (34) переписывается так:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{(0)(\xi)} &= A_{ij}^{(\xi\xi)} \epsilon_{kl}^*, \\ \epsilon_{ij}^{(1)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} A_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(0)(\eta)}, \\ \epsilon_{ij}^{(2)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} A_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(1)(\eta)}, \\ \epsilon_{ij}^{(3)(\xi)} &= \sum_{\eta \neq \xi} A_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(2)(\eta)}, \\ &\dots \text{ и т.д.,} \end{aligned} \quad (37)$$

где введен еще один тензор

$$\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\eta)} \equiv [I_{ijmn} - \tilde{B}_{ijmn}^{(\xi\xi)}]^{-1} \tilde{B}_{mnl}^{(\xi\eta)} = \tilde{A}_{ijmn}^{(\xi\xi)} \tilde{B}_{mnl}^{(\xi\eta)}. \quad (38)$$

Сложив все уравнения в (37), получим уравнение, связывающее полные деформации во всех зернах,

$$\epsilon_{ij}^{(\xi)} = \tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\xi)} \epsilon_{kl}^* + \sum_{\eta \neq \xi} \tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\eta)} \epsilon_{kl}^{(\eta)}. \quad (39)$$

Из последнего уравнения видно, что тензор  $\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\eta)}$  описывает взаимодействие упругопластических деформаций в  $\xi$ -м и  $\eta$ -м зернах, а  $\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi\xi)}$  – внутризеренное взаимодействие.

Система (34) нелинейная, так как коэффициенты  $\tilde{B}_{ijmn}^{(\xi\eta)}$  зависят от искомой полной деформации и мезодеформаций. Таким образом, каждая подсистема в (34) и система в целом являются нелинейными алгебраическими. Они решаются методом последовательных итераций. Применен следующий алгоритм вычислений. задается фиксированное значение макродеформации  $\epsilon_{kl}^*$ . На первой итерации все секущие модули полагаются равными упругим модулям. Численно находятся коэффициенты  $\tilde{B}_{ijmn}^{(\xi\eta)}$  в левых частях уравнений с этими модулями, и решается линеаризованная система (34). Полученное решение принимается за нулевое приближение. На следующем шаге по найденному нулевому приближению для мезодеформаций уточняются (перевычисляются) значения секущих модулей по формулам из подразд. 2 настоящей статьи, уточняются все коэффициенты в левых частях уравнений, снова решается линеаризованная система. Процесс продолжается до достижения стационарного состояния с требуемой точностью. Вычислительные эксперименты показали, что такой алгоритм дает устойчивое решение с точностью не хуже 1 % не более чем за десять итераций. Алгоритм реализован в среде Java для высокопроизводительной настольной платформы.

Значение мезодеформации в фиксированном по форме и ориентации зерне зависит от взаимодействия с окружающими зернами. Интенсивность этого взаимодействия (при фиксированных формах и размерах зерен) зависит от взаимной ориентации кристаллографических осей взаимодействующих зерен и расстояния между ними. В определенных конфигурациях это взаимодействие максимально. При анализе локализованных критических явлений эти конфигурации микроструктуры представляют значительный интерес. Им соответствуют экстремальные флуктуации в фиксированном зерне, которые ведут к инициации разрушения в таких зернах. В приложении теоретико-полевого подхода к упругопластическому деформированию поликристаллов ограничимся анализом таких экстремальных состояний на начальных этапах пластического макродеформирования при малых макроскопических пластических деформациях.

Структура левых частей всех уравнений в системе (34) одинакова. Нужен единственный код решения системы нелинейных уравнений размерностью 9x9 или 6x6. Последовательным применением кода сначала для первого уравнения (поправки нулевого порядка), а затем для всех остальных, подставляя в правые части решения для предыдущих поправок, можно получить решения формально с любой точностью.

Для практического решения уравнений (34) необходимо задаться моделью деформирования одиночного зерна-монокристалла и исследовать сходимость процедуры последовательного нахождения поправок. Кроме того, нужно оценить минимально необходимое число взаимодействующих зерен, входящих в правые части уравнений. Оно связано со скоростью уменьшения интенсивности взаимодействия при увеличении расстояния между зернами.

## 2. Модель упругопластического деформирования монокристалла зерна

В работе принимается, что единственным физическим механизмом пластической деформации является скольжение по кристаллографическим плоскостям с наибольшими плотностями упаковки атомов в решетках монокристаллов. Скольжение происходит в соответствии с законом Шмида: скольжение наступает при превышении разрешающих напряжений критических значений в каждой системе скольжения. При этом предполагается, что при наличии упрочнения рост (инкремент) разрешающих напряжений превышает скорость (инкремент) роста критических разрешающих напряжений в активных системах скольжения.

В этом параграфе все величины относятся к кристаллографической системе координат  $\xi$ -го зерна.

Пусть зерно-монокристалл подвергнут однородной пластической деформации, так, что в некоторых системах скольжения произошли пластические сдвиги. Будем нумеровать системы скольжения в монокристалле индексом  $g$ . Пусть  $\vec{n}^g$  – нормаль к плоскости скольжения системы  $g$ , а  $\vec{m}^g$  – направление скольжения в этой системе. Ориентационный тензор Шмида системы  $g$  имеет вид

$$R_{ij}^g = \frac{1}{2}(n_i^g m_j^g + n_j^g m_i^g). \quad (40)$$

Если обозначить величину скольжения в системе  $g$  как  $\gamma^g$ , то пластическая часть полной деформации в  $\xi$ -м зерне представима в виде [18]

$$\varepsilon_{ij}^{pl(\xi)} = \sum_{g=1}^N R_{ij}^g \gamma^g, \quad (41)$$

где  $N$  – количество систем скольжения.

Уравнение (41) можно разрешить относительно  $\gamma^g$ . Умножим обе части на  $R_{ij}^g$  и просуммируем по индексам  $i$  и  $j$ :

$$R_{ij}^g \varepsilon_{ij}^{pl(\xi)} = \sum_{h=1}^N R_{ij}^g R_{ij}^h \gamma^h. \quad (42)$$

Выражение (42) есть система линейных уравнений относительно  $N$  неизвестных  $\gamma^g$ . Введем квадратную матрицу в пространстве индексов систем скольжения, которые пишем в верхнем положении (в отличие от «координатных» индексов – индексов ортов систем координат, записываемых внизу):

$$Q^{gh} = R_{ij}^g R_{ij}^h. \quad (43)$$

Тогда имеем

$$\sum_{h=1}^N Q^{gh} \gamma^h = R_{ij}^g \varepsilon_{ij}^{pl(\xi)}$$

и решение

$$\gamma^h = \sum_{g=1}^N Q_{-1}^{hg} R_{ij}^g \varepsilon_{ij}^{pl(\xi)}, \quad (44)$$

где обратная матрица  $Q_{-1}^{hg}$  определяется соотношением

$$\sum_{g=1}^N Q_{-1}^{hg} Q^{gf} = \delta^{hf},$$

а  $\delta^{gh}$  – символ Кронекера по индексам систем скольжения.

Можно выразить сдвиги  $\gamma^g$  через полные деформации с помощью условий скольжения  $\tau^g = \tau_{cr}^g$  ( $N$  условий), выраженных через деформации  $\gamma^g$ . Для этого упругопластические определяющие соотношения деформационного типа запишем в двух вариантах:

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = \tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)}(\varepsilon) \varepsilon_{kl}^{(\xi)} \quad (45)$$

и

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} \left( \varepsilon_{kl}^{(\xi)} - \varepsilon_{kl}^{pl(\xi)} \right), \quad (46)$$

где  $\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)}$  и  $C_{ijkl}^{(\xi)}$  – тензоры секущих модулей и модулей упругости соответственно.

Разрешающее напряжение сдвига  $\tau^g$  в системе скольжения  $g$  связано с тензором напряжений в зерне соотношением

$$\tau^{g(\xi)} = R_{ij}^g \sigma_{ij}^{(\xi)}. \quad (47)$$

Подставляя в (47) формулы (46) и (44), имеем

$$\tau^{g(\xi)} = R_{ij}^g \sigma_{ij}^{(\xi)} = R_{ij}^g C_{ijkl}^{(\xi)} \left( \varepsilon_{kl}^{(\xi)} - \sum_{h=1}^N R_{kl}^h \gamma^h \right). \quad (48)$$

Если система скольжения активна, то для нее должно быть

$$\tau^g = \tau_{cr}^g \quad (49)$$



или

$$\tau^g = -\tau_{cr}^g, \quad (50)$$

если  $\tau^g$ , найденное по  $\tau^{g(\xi)} = R_{ij}^g \sigma_{ij}^{(\xi)}$ , отрицательно. Здесь  $\tau_{cr}^g$  – критическое разрешающее напряжение Шмида в системе скольжения  $g$ . Кроме того, при наличии упрочнения должно выполняться дополнительное условие для инкрементов

$$d\tau^g \geq d\tau_{cr}^g, \quad (51)$$

иначе деформирование будет продолжаться упруго.

Ниже для краткости временно опускаем индекс зерна  $\xi$ , но все выражения относятся к конкретному зерну.

Предполагаем линейный закон упрочнения, который запишем в виде

$$\tau_{cr}^g = \tau_{cr}^{0g} + \sum_{h=1}^N H^{gh} \gamma^h = \sum_{h=1}^N \left[ \frac{\tau_{cr}^{0g}}{\gamma^g} \delta^{gh} + H^{gh} \right] \gamma^h, \quad (52)$$

где  $\tau_{cr}^{0g}$  – начальное значение критического напряжения;  $H^{gh}$  – матрица упрочнения.

Подставляем (48) и (52) в условие скольжения (49):

$$\begin{aligned} \tau^g &= R_{ij}^g C_{ijkl} (\epsilon_{kl} - \sum_{h=1}^N R_{kl}^h \gamma^h) = \\ &= \tau_{cr}^g = \sum_{h=1}^N \left[ \frac{\tau_{cr}^{0g}}{\gamma^g} \delta_{gh} + H^{gh} \right] \gamma^h. \end{aligned} \quad (53)$$

Переписываем (53) так:

$$\sum_{h=1}^N \left[ \frac{\tau_{cr}^{0g}}{\gamma^g} \delta^{gh} + H^{gh} + R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h \right] \gamma^h = R_{ij}^g C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (54)$$

Выражение (54) есть система  $N \times N$  нелинейных (так как коэффициенты – квадратные скобки – зависят от  $\gamma^h$ ) уравнений относительно  $\gamma^h$ . Формально преобразуем ее с помощью матричных операций. В квадратных скобках в (54) стоит квадратная матрица. Обозначим эту матрицу  $P^{gh}$ ,

$$P^{gh} \equiv \frac{\tau_{cr}^{0g}}{\gamma^g} \delta^{gh} + H^{gh} + R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h \quad (55)$$

и перепишем (54) в кратком виде, используя общепринятое правило суммирования по повторяющимся индексам:

$$P^{gh} \gamma^h = R_{ij}^g C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (56)$$

Если ввести матрицу  $P_{-1}^{gh}$ , обратную  $P^{gh}$ ,

$$P_{-1}^{gh} P^{hq} = \delta^{gq}, \quad (57)$$

то получим формальное решение системы (56) для  $\gamma^g$  в виде

$$\gamma^g = \sum_{h=1}^N P_{-1}^{gh} R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} \equiv P_{-1}^{gh} R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl}. \quad (58)$$

Уравнение (58) выражает пластические сдвиги в активных системах через полную деформацию, содержащую упругую и пластическую части. На самом деле (58) не решение, а новое уравнение, так как правая часть зависит от  $\gamma^g$  через матрицу  $P_{-1}^{gh}$ .

С помощью (58) получим связь пластической части деформации с полной деформацией:

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^{pl(\xi)} &= \sum_{g=1}^N R_{ij}^g \gamma^g = \\ &= \sum_{g,h=1}^N R_{ij}^g P_{-1}^{gh} R_{ij}^h C_{ijkl}^{(\xi)} \epsilon_{kl}^{(\xi)} \equiv R_{ij}^g P_{-1}^{gh} R_{ij}^h C_{ijkl}^{(\xi)} \epsilon_{kl}^{(\xi)}. \end{aligned} \quad (59)$$

Возвращаемся к закону Гука (46) и подставим в него (59):

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} \epsilon_{kl}^{(\xi)} - C_{ijrs}^{(\xi)} \sum_{g,h=1}^N R_{rs}^g P_{-1}^{gh(\xi)} R_{tu}^h C_{tukl}^{(\xi)} \epsilon_{kl}^{(\xi)}. \quad (60)$$

Сравнивая (60) с определяющим соотношением упругопластического деформирования (45), получим выражение для тензора секущих модулей зерна в кристаллографической системе координат кристалла

$$\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} - C_{ijrs}^{(\xi)} \sum_{g,h=1}^N R_{rs}^g P_{-1}^{gh(\xi)} R_{tu}^h C_{tukl}^{(\xi)}. \quad (61)$$

Уравнением (61) завершается построение модели упругопластического деформирования монокристалла зерна в рамках деформационного подхода. Уравнение (61) для секущих модулей по структуре аналогично уравнениям для касательных модулей в инкрементальном подходе, полученным в ряде работ [19–22]. Однако инкрементальные уравнения для деформаций более сложны в решении и в упомянутых работах практически не решаются. Вместо этого применяют различные схемы самосогласования [23, 24].

Зависимость секущего модуля от полной деформации сосредоточена в матрице  $P^{gh}$  через  $\gamma^g$  и уравнение (58). Эта зависимость, несмотря на внешнюю простоту (61), весьма сложная и нелинейная.

Формула (61) справедлива, если хотя бы одна  $\gamma^g$  отлична от нуля. Иначе  $\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)}$ . Это следует из того, что при всех  $\gamma^h = 0$  становится несправедливым исходное соотношение (54), в котором левая часть обращается в ноль, а правая нет.

В уравнении (61) содержатся тензоры с обычными пространственными индексами ( $ijkl$ ) и матрицы по индексам систем скольжения ( $gh$ ). Уравнению (61) можно придать характерный для уравнений квантовой теории взаимодействующих полей «перенормировочный» вид [25]:

$$\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} - C_{ijrs}^{(\xi)} \Gamma_{rskl}^{(\xi)} C_{rskl}^{(\xi)}, \quad (62)$$

где

$$\Gamma_{rskl}^{(\xi)} = \sum_{g,h=1}^N R_{rs}^{g(\xi)} P_{-1}^{gh(\xi)} R_{kl}^{h(\xi)} - \quad (63)$$

обычный тензор. Пластические деформации эквивалентны наличию дополнительных фиктивных объемных сил [26, 27]. Можно сказать, что эти силы трансформируют («перенормируют») упругие модули в секущие, а  $\Gamma_{rskl}^{(\xi)}$  есть перенормирующий множитель, зависящий от полной деформации. В квантовой теории взаимодействия полей описывается величинами типа  $\Gamma_{rskl}^{(\xi)}$  в лагранжиане, а система взаимодействующих полей сводится к не взаимодействующим полям, но при этом перенормируются свойства полей по формулам типа (62).

Идентификация матриц упрочнения для конкретных материалов по экспериментальным данным весьма проблематична. Представляется интересным рассмотреть случай пренебрежимо малого упрочнения и независимости систем скольжения. В этом случае сдвиги в плоскостях скольжения упруго-идеально-пластические. Тогда условие для инкрементов выполняется тривиально, а условия скольжения (49) в системах запишутся так:

$$\tau^g = R_{ij}^g \sigma_{ij}^{(\xi)} = R_{ij}^g C_{ijkl} (\epsilon_{kl} - \sum_{h=1}^N R_{kl}^h \gamma^h) = \tau_{cr}^g, \quad (64)$$

$$g = 1, 2, \dots, N.$$

В (64) отдельные  $\gamma^h$  могут быть положительными или отрицательными, соответственно, они могут давать уменьшающий или увеличивающий вклад (с учетом умножения на тензор Шмида) в разрешающее напряжение  $\tau^g$ . Переписываем (64) в виде системы линейных уравнений для  $\gamma^g$ :

$$\sum_{h=1}^N [R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h] \gamma^h = R_{ij}^g C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \tau_{cr}^g. \quad (65)$$

Решение для  $\gamma^g$  записываем по аналогии с (54) в виде

$$\gamma^g = \sum_{h=1}^N P_{-1}^{gh} (R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \tau_{cr}^h) \equiv P_{-1}^{gh} (R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \tau_{cr}^h), \quad (66)$$

в котором матрица  $P^{gh}$  имеет простую в сравнении с (55) форму:

$$P^{gh} \equiv R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^h. \quad (67)$$

Геометрический смысл (66) проясняется, если рассмотреть формально случай всего одной плоскости скольжения без упрочнения и в ней одного направления скольжения. Тогда матрица  $P^{gh}$  упрощается:  $P^{gh} = R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^g \delta^{gh}$  (по индексу  $g$  нет суммирования), и обратная матриц легко находится:

$$P_{-1}^{gh} = \frac{1}{R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^g} \delta^{gh},$$

а для сдвигов получается простое алгебраическое выражение

$$\gamma^g = \frac{1}{R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^g} (R_{ij}^g C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \tau_{cr}^g).$$

Легко показать, что  $R_{ij}^g C_{ijkl} R_{kl}^g = C'_{nnmm}$  – сдвиговая компонента тензора модулей упругости в системе координат с ортами  $\bar{n}^g, \bar{m}^g, [\bar{n}^g \times \bar{m}^g]$  в плоскости  $\bar{n}^g - \bar{m}^g$ ,  $R_{ij}^g C_{ijkl} \epsilon_{kl} = \tau^{elastic}$  – формально упругое разрешающее сдвиговое напряжение в плоскости  $\bar{n}^g - \bar{m}^g$ ; и получаем  $\gamma^g = \frac{1}{C'_{nnmm}} (\tau^{elastic} - \tau_{cr}^g)$ . Это – закон Гука для сдвига в плоскости  $\bar{n}^g - \bar{m}^g$ .

Каждое слагаемое в круглых скобках (66) имеет смысл, если в данной системе  $h$

$$R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} \geq \tau_{cr}^h, \quad (68)$$

тогда конкретный вклад в сдвиг  $\gamma^g$  положителен, или если выполняется условие

$$R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} \leq -\tau_{cr}^h, \quad (69)$$

то соответствующий вклад в  $\gamma^g$  отрицателен и (66) надо писать в виде

$$\gamma^g = \sum_{h=1}^N P_{-1}^{gh} (R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \tau_{cr}^h) \equiv P_{-1}^{gh} (R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} + \tau_{cr}^h). \quad (70)$$

В диапазоне полных деформаций (для каждой системы скольжения)

$$-\tau_{cr}^h < R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} < \tau_{cr}^h \quad (71)$$

надо полагать соответствующий вклад в  $\gamma^g$  равным нулю.

Выражения (66) и (70) можно объединить в единую формулу

$$\gamma^g = \sum_{h=1}^N P_{-1}^{gh} (R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \tau_{cr}^h) \equiv P_{-1}^{gh} [R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl} - \text{sign}(R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl}) \cdot \tau_{cr}^h]. \quad (72)$$

При значениях полной деформации в диапазоне условий (71) выражения (66), (70), (72) для пластических сдвигов неприменимы, они обращаются в ноль.

Для связи пластической деформации с полной получается выражение

$$\epsilon_{ij}^{pl} = \sum_{g,h=1}^N R_{ij}^g P_{-1}^{gh} (R_{rs}^h C_{rskl} \epsilon_{kl} - \text{sign}(R_{ij}^h C_{ijkl} \epsilon_{kl}) \cdot \tau_{cr}^h), \quad (73)$$

а закон Гука принимает вид (ниже снова вводим индекс зерна  $\xi$ )

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} \epsilon_{kl}^{(\xi)} - C_{ijkl}^{(\xi)} \sum_{g,h=1}^N R_{kl}^g P_{-1}^{gh(\xi)} \times$$

$$\times \left( R_{tu}^{h(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} \varepsilon_{vw}^{(\xi)} - \text{sign}(R_{ij}^{h(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)}) \cdot \tau_{cr}^h \right). \quad (74)$$

Его можно записать иначе, тождественно введя во втором члене полную деформацию следующим образом:

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)} - C_{ijkl}^{(\xi)} \sum_{g,h=1}^N R_{kl}^{g(\xi)} P_{-1}^{gh(\xi)} \times \\ \times \left( R_{tu}^{h(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} - \text{sign}(R_{ij}^{h(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)}) \cdot \tau_{cr}^h \frac{\varepsilon_{vw}^{(\xi)}}{I_2} \right) \varepsilon_{vw}^{(\xi)}, \quad (75)$$

где  $I_2 = \varepsilon_{vw} \varepsilon_{vw}$  – второй инвариант.

Тогда для тензора секущих модулей зерна получается следующее выражение:

$$\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} - C_{ijrs}^{(\xi)} \sum_{g,h=1}^N R_{rs}^{g(\xi)} P_{-1}^{gh(\xi)} \times \\ \times \left( R_{tu}^{h(\xi)} C_{tukl}^{(\xi)} - \text{sign}(R_{ij}^{h(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)}) \cdot \tau_{cr}^h \frac{\varepsilon_{kl}^{(\xi)}}{I_2} \right). \quad (76)$$

Из экспериментально идентифицируемых параметров в выражение для секущих модулей (76) входят только критические разрешающие напряжения в системах скольжения, в настоящее время измеренные для многих материалов.

Дальнейшие упрощения возможны, если ограничиться учетом лишь одной системы скольжения. Этот случай достаточно реалистичен. Например, в монокристалле чистого титана имеются три плоскости скольжения [28]: призматическая, базовая и пирамидальная, критические напряжения для которых соответственно равны 60, 120 и 120–180 МПа [29]. Так что при малых деформациях активируется только одна призматическая система скольжения. Кроме того, в поликристаллическом титане до макродеформаций 3 % при одноосном растяжении упрочнение практически отсутствует [30]. Наличие одной активной системы скольжения характерно для многих кристаллов с гексагональной плотно упакованной решеткой [31]. Ограничение учетом одной системы скольжения в таких анизотропных материалах представляется адекватным при рассмотрении критических явлений типа зарождения пластических сдвигов в отдельных зернах, имеющих место при малых макронапряжениях и макродеформациях поликристаллов.

В одной системе скольжения  $g$  при отсутствии упрочнения разрешающее сдвиговое напряжение по мере роста деформации линейно увеличивается до критического значения и далее остается постоянным:

$$\tau^g = \tau_{cr}^g, \text{ при } \gamma^g \geq 0. \quad (77)$$

Условие скольжения (77) принимает вид

$$\tau^g = R_{ij}^{g(\xi)} \sigma_{ij}^{(\xi)} = R_{ij}^{g(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} (\varepsilon_{kl}^{(\xi)} - R_{kl}^{g(\xi)} \gamma^g) = \tau_{cr}^{g(\xi)}, \quad (78)$$

откуда

$$\gamma^g = \frac{R_{ij}^{g(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)} - \tau_{cr}^{g(\xi)}}{R_{ij}^{g(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} R_{kl}^{g(\xi)}} \quad (79)$$

и

$$\varepsilon_{ij}^{pl(\xi)} = R_{ij}^{g(\xi)} \frac{R_{pq}^{g(\xi)} C_{pqrs}^{(\xi)} \varepsilon_{rs}^{(\xi)} - \tau_{cr}^{g(\xi)}}{R_{tu}^{g(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} R_{vw}^{g(\xi)}}. \quad (80)$$

Закон Гука принимает вид

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)} - \frac{C_{ijxy}^{(\xi)} R_{xy}^{g(\xi)} R_{pq}^{g(\xi)} C_{pqrs}^{(\xi)}}{R_{tu}^{g(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} R_{vw}^{g(\xi)}} \varepsilon_{rs}^{(\xi)} + \\ + \frac{C_{ijxy}^{(\xi)} R_{xy}^{g(\xi)}}{R_{tu}^{g(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} R_{vw}^{g(\xi)}} \tau_{cr}^{g(\xi)}. \quad (81)$$

Учтем, что в (81) произведение  $R_{pq}^{g(\xi)} C_{pqrs}^{(\xi)} \varepsilon_{rs}^{(\xi)}$  есть скаляр (зависящий от деформации), а также скаляром является постоянный знаменатель, который обозначим через  $\Phi$ :

$$\Phi = R_{tu}^{g(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} R_{vw}^{g(\xi)}. \quad (82)$$

Поэтому (81) можно переписать в виде

$$\sigma_{ij}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)} - \frac{1}{\Phi} \left[ 1 - \frac{\tau_{cr}^{g(\xi)}}{R_{pq}^{g(\xi)} C_{pqrs}^{(\xi)} \varepsilon_{rs}^{(\xi)}} \right] \times \\ \times C_{ijxy}^{(\xi)} R_{xy}^{g(\xi)} \cdot R_{pq}^{g(\xi)} C_{klpq}^{(\xi)} \cdot \varepsilon_{kl}^{(\xi)}. \quad (83)$$

Отсюда получаем выражения для тензора секущих модулей в рассматриваемом случае:

$$\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)} - \frac{1}{\Phi} \left[ 1 - \frac{\tau_{cr}^{g(\xi)}}{R_{tu}^{g(\xi)} C_{tuvw}^{(\xi)} \varepsilon_{vw}^{(\xi)}} \right] C_{ijxy}^{(\xi)} R_{xy}^{g(\xi)} \cdot C_{klpq}^{(\xi)} R_{pq}^{g(\xi)}. \quad (84)$$

Выражение (84) справедливо для деформаций  $\left| R_{ij}^{g(\xi)} C_{ijkl}^{(\xi)} \varepsilon_{kl}^{(\xi)} \right| \geq \tau_{cr}^{g(\xi)}$ , в противном случае  $\tilde{C}_{ijkl}^{(\xi)} = C_{ijkl}^{(\xi)}$ .

### 3. Особенности упругопластического взаимодействия зерен и экстремальные микроструктуры

Упругопластическое взаимодействие деформаций разных зерен описывается коэффициентами тензора  $\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi)}$ . Для каждой пары зерен тензор  $\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi)}$  имеет 36 компонентов. Свойства симметрии по перестановкам такие же, как для случая упругого деформирования [17]: тензор симметричен по перестановке индексов первой и второй пары, но несимметричен по перестановке пар индексов, что делает взаимодействие несимметричным относительно взаимодействующих зерен. Величина коэффициентов взаимодействия зависит от расстояния между зернами и ориентации их кристаллографических осей. Вычисления для различных типов зерен показывают, что зависимость от расстояния и ориентации осей зерен в упругопластическом случае подобна такой же зависимости для упругого взаимодействия [17]. Величина коэффициентов сильно зависит от упругой анизотропии зерен и достаточно медленно убывает с расстоянием между зернами.

Коэффициенты упругопластических межзеренных взаимодействий зависят от мезодеформаций в зернах, в отличие от чисто упругих взаимодействий, которые не зависят от деформированного состояния зерен [17]. Эту зависимость исследуем на примере двух соседних зерен титана кубической формы. Зерна расположим вдоль оси координат  $X_3$ . Оси гексагональной упругой симметрии обоих зерен направим вдоль оси  $X_3$ . В обоих зернах активны только призматические системы скольжения с вектором нормали плоскости скольжения  $\vec{n} = (0, 1, 0)$  и вектором направления скольжения  $\vec{m} = (1, 0, 0)$  в выбранной системе координат. Зерна подвергнуты деформации простого сдвига в плоскости  $X_1-X_2$ , так что единственная ненулевая компонента деформаций в зернах  $\epsilon_{12}$ . Для вычислений используем зависимости секущих модулей зерен от мезодеформаций по формулам (84), соответствующим одной активной системе скольжения. По вычисленным секущим модулям для заданной мезодеформации численно находятся коэффициенты  $\tilde{B}_{ijmn}^{(\xi n)}$  по формулам (35), а затем  $\tilde{A}_{ijkl}^{(\xi n)}$  по формулам (38). В таблице приведены вычисленные значения характерных компонент тензоров коэффициентов межзеренного взаимодействия – нормальных с нормальными ( $\tilde{A}_{1122}^{(\xi n)}$ ) и сдвиговых со сдвиговыми ( $\tilde{A}_{1212}^{(\xi n)}$ ) деформациями в зависимости от полных деформаций в зернах. Рассмотрены четыре возможных комбинации взаимодействий: упруго-упругое, упруго-упругопластическое, упругопластическое-упругое и упругопластическое-упругопластическое взаимодействия.

Зависимость коэффициентов взаимодействия от полной деформации в зернах

Interaction coefficients dependence on full strain in grains

	$\epsilon_{12}$	0	0,1 %	0,2 %	0,3 %	0,4 %	0,5 %
Упруго-упругое	$\tilde{A}_{1122}^{(el-el)} \cdot 10^3$	-3,596	-3,596	-3,596	-3,596	-3,596	-3,596
	$\tilde{A}_{1212}^{(el-el)} \cdot 10^3$	6,754	6,754	6,754	6,754	6,754	6,754
Упруго-упругопласт.	$\tilde{A}_{1122}^{(el-pl)} \cdot 10^3$	-3,596	-3,663	-3,670	-3,628	-3,624	-3,610
	$\tilde{A}_{1212}^{(el-pl)} \cdot 10^3$	6,754	10,708	22,159	25,915	27,855	28,955
Упругопласт.-упругое	$\tilde{A}_{1122}^{(pl-el)} \cdot 10^3$	-3,596	-3,589	-3,645	-3,703	-3,658	-3,686
	$\tilde{A}_{1212}^{(pl-el)} \cdot 10^3$	6,754	7,372	9,561	10,440	10,956	11,219
Упругопласт.-упругопласт.	$\tilde{A}_{1122}^{(pl-pl)} \cdot 10^3$	-3,596	-3,595	-3,598	-3,626	-3,646	-3,656
	$\tilde{A}_{1212}^{(pl-pl)} \cdot 10^3$	6,754	11,723	31,442	40,127	44,988	47,849

Из таблицы видно, что интенсивность взаимодействия двух пластически деформированных зеренкратно выше, чем тех же двух упругодеформированных (при полной деформации 0,5 % более чем в 7 раз). Взаимодействие двух по-разному деформированных зерен несимметрично. Действие пластически деформированного зерна на упругое в среднем в 2,5 раза интенсивнее действия упругодеформированного зерна на пластически

деформированное. Это означает, что пластически деформированное зерно при росте макродеформации оказывает возрастающее влияние на соседние упругие зерна, способствуя развитию в них пластических деформаций. Таким образом, локально возникшая в одном зерне пластическая деформация быстро распространяется на соседние зерна, способствуя делокализации очагов пластического деформирования и гомогенизации мезодеформаций.

Очаги пластических деформаций возникают в специфических кластерах зерен, в которых флуктуирующие поля деформаций принимают экстремальные значения. Разработанный формализм позволяет находить такие кластеры в случайной микроструктуре поликристалла при различных типах макронагружения, одноосных и многоосных, и исследовать эволюцию деформированного состояния зерен в кластере при увеличении макродеформации всего поликристалла. Для вычислительного поиска нужно сгенерировать большой ансамбль случайных микроструктур поликристалла, решить для каждой реализации микроструктуры из ансамбля краевую задачу деформирования и выбрать микроструктуру с экстремальными деформациями в каком-либо выбранном зерне.

Рассмотрим кластер зерна размером 3x3x3, погруженный в осредненную среду остальных зерен поликристаллического титана (рисунок, слева), и найдем конфигурацию микроструктуры, приводящую к максимальной деформации в центральном зерне кластера. Хотя в таком кластере взаимодействуют только ближайшие зерна-соседи (для кубических зерен одинакового размера число ближайших соседей центрального зерна равно 26), то все равно ясно, что нужно сгенерировать неимоверно большое число случайных конфигураций микроструктур кластера и решить для каждой такое же число краевых задач, из решений которых выбрать экстремальное. Аддитивность предлагаемого подхода позволяет сократить объем необходимой вычислительной работы на много порядков. Достаточно найти экстремальную ориентацию каждого зерна-соседа по отдельности. Решить для него «парную» краевую задачу, а затем сложить результаты решений «парных» задач для всех соседей.

Рассмотрим для примера еще раз макроскопический сдвиг поликристаллического титана в плоскости  $X_1X_2$  с учетом только одной призматической системы скольжения и без упрочнения. Без учета межзеренных взаимодействий максимальные разрешающие сдвиговые напряжения генерируются в зернах, в которых плоскость пирамидального скольжения параллельна плоскости  $X_1X_3$ . Это зерна предпочтительной в отношении пластического деформирования ориентации, мягкие зерна [6, 8]. В нашем подходе этому соответствует нулевое решение по межзеренному взаимодействию – решение первого уравнения в (34). Фиксируем в качестве такого «мягкого зерна» центральное зерно кластера.

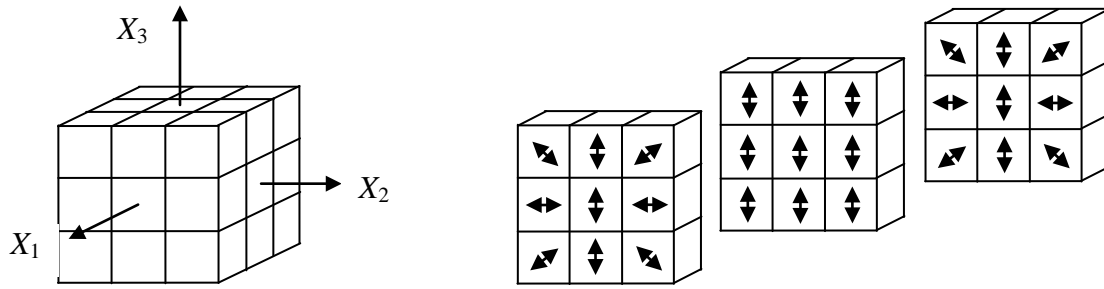


Рис. Ориентации зерен в экстремальном кластере

Fig. Grains orientations in extreme cluster

Взаимодействие с соседями увеличивает деформацию в мягком зерне. Поправки от взаимодействия даются правыми частями уравнений в (34). Величины добавок зависят от ориентации кристаллографических осей взаимодействующих зерен. Разработанный алгоритм для заданной макродеформации находит ориентации соседних зерен, дающие максимальные вклады, на большом массиве ориентаций и визуализирует эти ориентации. Найденная структура экстремального кластера, приводящая к максимальному значению сдвиговой деформации в центральном зерне при макродеформации сдвига  $\varepsilon_{12}^* = 0,2\%$ , показана в правой части рисунка. Кластер образует симметричный паттерн. Для наглядности зерна разделены на три слоя, параллельные плоскости сдвига, и условно разнесены. Обоюдоострые стрелки изображают оси гексагональной упругой симметрии зерен, а их наклон имитирует углы, образуемые этими осями с осью  $X_3$  системы координат в экстремальной конфигурации.

Проследим эволюцию деформирования двух исследуемых взаимодействующих зерен – центрального зерна и зерна в зените кластера.

Вычисления по разработанному алгоритму решения систем уравнений (34) для мезодеформаций в первом порядке теории возмущений (чему соответствуют первые два уравнения в системе) с учетом взаимодействий всех зерен в кластере дают следующие результаты.

До макродеформации  $\varepsilon_{12}^* = 0,085\%$  все зерна кластера деформируются упруго. При этой макродеформации мезодеформация в центральном зерне кластера  $\varepsilon_{12}^{(\text{центр})} = 0,113\%$  (на 33% больше макродеформации), а разрешающее сдвиговое напряжение в призматической системе скольжения сравнивается с критическим:  $\tau_{12}^{(\text{центр})} = \tau_{cr} = 60$  МПа. Мезодеформация зерна в зените  $\varepsilon_{12}^{(\text{зенит})} = 0,098\%$ , а разрешающее сдвиговое напряжение в нем  $\tau_{12}^{(\text{зенит})} = 52,0$  МПа меньше критического. В остальных зернах мезодеформации значительно меньше (кроме зерна в надире, эволюционирующего так же, как зерно в зените). Мезодеформации в рассматриваемых зернах отличаются в  $\varepsilon_{12}^{(\text{центр})} : \varepsilon_{12}^{(\text{зенит})} = 1,15$  раз.

При макродеформации  $\varepsilon_{12}^* = 0,1\%$  начинается пластическое скольжение в центральном зерне. Полная мезодеформация в нем увеличивается до  $\varepsilon_{12}^{(\text{центр})} = 0,133\%$ . Полная мезодеформация в зенитном зерне увеличивается до  $\varepsilon_{12}^{(\text{зенит})} = 0,121\%$ . Различие деформаций в паре зерен уменьшается до  $\varepsilon_{12}^{(\text{центр})} : \varepsilon_{12}^{(\text{зенит})} = 1,10$  раз.

При макродеформации  $\varepsilon_{12}^* = 0,2\%$  полные мезодеформации в рассматриваемых зернах становятся соответственно:  $\varepsilon_{12}^{(\text{центр})} = 0,266\%$  и  $\varepsilon_{12}^{(\text{зенит})} = 0,247\%$ . Межзеренная неоднородность деформаций становится еще меньше:  $\varepsilon_{12}^{(\text{центр})} : \varepsilon_{12}^{(\text{зенит})} = 1,07$ .

Таким образом, упругопластическое взаимодействие зерен приводит к существенному уравниванию деформаций в рассмотренной паре зерен. С такой же скоростью происходит выравнивание деформаций в зерне в надире кластера. Деформации в остальных зернах кластера меньше, но пластическое деформирование начинается и в них и ведет к снижению неоднородностей деформаций. В целом происходит гомогенизация деформаций в зернах при увеличении макродеформации, качественно описанная выше, даже при относительно малых макродеформациях в несколько десятых долей процента. При больших макродеформациях активизируются другие системы скольжения, гомогенизация усиливается и распространяется на остальные зерна кластера.

Эффект гомогенизации проявляется и на уровне одного зерна, если его разбить на малые субзерна и применить описанную в работе [32] методику вычисления неоднородных мезодеформаций. Все субзерна в зерне имеют одинаковую ориентацию кристаллографических осей и систем скольжения. Вследствие этого коэффициенты взаимодействия субзерен в одном зерне выше, чем межзеренные коэффициенты, и эффект гомогенизации проявляется сильнее. Экспериментальные измерения деформаций в индивидуальных зернах с помощью современных источников синхротронного рентгеновского излучения, методов микрорентгеномографии и дифракции нейтронов [33, 34] подтверждают высокую степень однородности пластических мезодеформаций. Заметная неоднородность наблюдается только вблизи стыков границ зерен.

## Заключение

Развитый ранее авторами теоретико-полевой подход к проблеме упругого деформирования поликристаллических материалов распространен на упруго-пластические задачи. В постановке задачи используются определяющие соотношения деформационного типа. Дифференциальная форма краевой задачи упруго-пластического деформирования трансформируется в систему интегральных уравнений для мезодеформаций в зернах. Посредством кусочно-постоянной аппроксимации мезодеформаций система интегральных уравнений преобразуется в систему нелинейных алгебраических уравнений. Последние решаются методом теории возмущений по межзеренному взаимодействию и итераций по нелинейностям. Деформация в каждой точке поликристалла представляется в виде вкладов от парных взаимодействий со всеми зернами. Вследствие аддитивности этих вкладов решение краевой задачи для поликристаллического тела, содержащего макроскопически большое число зерен, разбивается на сумму решений двухзеренных задач. Численное решение парных задач значительно проще, чем для сплошного поликристаллического тела, составленного из множества зерен. Последнее обстоятельство позволяет кардинально, на много порядков, сократить вычислительную трудоемкость решения некоторых задач, таких

## Библиографический список

- Mishnaevsky L. Computational mesomechanics of composites. – John Wiley & Sons, 2007. – 276 p.
- Multiscale modeling and simulation of composite materials and structures. Eds. Y.W. Kwon, D.H. Allen, R. Talreja. – Springer Science+Business Media, LLC, 2008. – 630 p.
- Computational methods for microstructure-property relationships. Eds. S. Ghosh, D. Dimiduk. – Springer Science+ Business Media, LLC, 2011. – 658 p. DOI 10.1007/978-1-4419-0643
- Dunne F., Petrinic N. Introduction to computational plasticity. – Oxford: Oxford University Press, 2006. – 241 p.
- Computational crystal plasticity: from single crystal to homogenized polycrystals / G. Cailletaud, O. Diard, F. Feyel, S. Forest // Technische Mechanik. – 2003. – В. 23. – Heft 2-4. – S. 130–145.
- Birosca S. The deformation behaviour of hard and soft grains in RR1000 nickel-based superalloy // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. – 2015. – Vol. 82. – P. 012033.
- The development of grain-orientation dependent residual stress in a cyclically deformed alloy / Y. Wang, H. Tian, A. Stoica, X. Wang, P. Liaw, J. Richardson // Nature Materials. – 2003. – Vol. 2 | February. – P. 101–106.
- Polycrystal Plasticity: Comparison between grain-scale observations of deformation and simulations / R. Pokharel [et al.] // Annu. Rev. Condens. Matter Phys. – 2014. – Vol. 5. – P. 317–346.
- Przybyla C.P., McDowell D.L. Microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of Ni-base superalloy IN100 // Int. J. Plast. – 2010. – Vol. 26. – P. 372–394.
- Shenoy M., Zhang J., McDowell D.L. Estimating fatigue sensitivity to polycrystalline Ni-base superalloy microstructures

как поиск экстремальных микроструктур, в которых генерируются экстремально большие мезодеформации.

На примере поликристаллического титана исследованы особенности упругопластического взаимодействия зерен. Показано, что его интенсивность зависит от деформированного состояния зерен и существенно выше интенсивности упругого взаимодействия. При полных мезодеформациях в паре зерен 0,5 % это различие составляет 7 раз. Рост интенсивности упругопластического взаимодействия зерен при увеличении макродеформации поликристаллического тела приводит к гомогенизации мезодеформаций, что может быть одной из причин успеха простых моделей типа Тэйлора–Линя в описании пластического деформирования поликристаллов, полностью игнорирующих различие мезодеформаций в зернах.

## Благодарность

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 18-01-00675, 17-41-590433 p\_a).

## Acknowledgment

The work has been carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research (Grants No. 18-01-00675, 17-41-590433 p\_a).

using a computational approach // Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures. – 2007. – Vol. 30. – P. 889–904.

11. In situ imaging of high cycle fatigue crack growth in single crystal nickel-base superalloys by synchrotron X-radiation / L. Liu, N.S.Husseini, C.J. Torbet, D.P. Kumah, R. Vlarke, T.M. Pollock, J.W. Jones // Journal of Engineering Materials and Technology. – 2008. – Vol. 130. – P. 021008.

12. 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 Materialia. – 2012. – Vol. 20. – P. 2840–2854.

13. Multiscale modelling of plasticity and fracture by means of dislocation mechanics. R. Pippin, P. Gumbsch. – Springer Wien New York, 2010. – 394 p.

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

15. Shavshukov V., Tashkinov A. 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

16. Лифшиц И.М., Розенцвейг Л.Н. К теории упругих свойств поликристаллов // Журн. эксп. теор. физ. – 1946. – Т. 16, № 11. – С. 967–980.

17. 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

18. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого де-

формирования материалов. Ч. 1. Жесткопластические и упруго-пластические модели // Вестник Пермского национального исследовательского университета. Механика. – 2011. – № 1. – С. 5–45.

19. Lipinski P., Krier J., Berveiller M. Elastoplasticite des metaux en grandes deformations: comportement global et evolution de la structure interne // *Revue Phys. Appl.* – 1990. – Vol. 25. – P. 361–388.

20. Paquin A., Sabar H., Berveiller M. Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials // *Archive of Applied Mechanics.* – 1999. – Vol. 69. – P. 14–35.

21. Berveiller M., Zaoui A. Modelling of the plastic behavior of inhomogeneous media // *Journal of Engineering Materials and Technology.* – 1984. – Vol. 106. – P. 295–298.

22. Schmitt C., Lipinski P., Berveiller M. Micromechanical modelling of the elastoplastic behavior of polycrystals containing precipitates – Application to hypo- and hyper-eutectoid steels // *Int. J. Plasticity.* – 1997. – Vol. 13. – No. 3. – P. 183–199.

23. Strain localization analysis using a multiscale model / G. Franz, F. Abed-Meraim, T. Ben Zineb, X. Lemoine, M. Berveiller // *Computational Materials Science.* – 2009. – Vol. 45. – P. 768–773.

24. Franz G., Abed-Meraim F., Berveiller M. Strain localization analysis for single crystals and polycrystals: Towards microstructure-ductility linkage // *International Journal of Plasticity.* – 2013. – Vol. 46. – P. 1–33.

25. Боголюбов Н.Н., Ширков Д.В. Квантовые поля. – М.: Физматлит, 2005. – 384 с.

26. Lin T.H. Physical theory of plasticity // *Advances in Applied Mechanics.* – 1957. – Vol. 11. – P. 255–311.

27. Lin T.H., Ribeiro S. Development of a physical theory of plasticity // *Int. J. Solids Structures.* – 1981. – Vol. 17. – P. 545–551.

28. Deformation-mechanism maps. The plasticity and Creep of Metals and Ceramics / H.J. Frost, M.F. Ashby. – Oxford; New York: Pergamon Press, 1989. – 328 p.

29. Britton T.B., Dunne F.P.E., Wilkinson A.J. On the mechanistic basis of deformation at the microscale in hexagonal close-packed metals // *Proc. Roy. Soc. A.* – 2015. – Vol. 471. – P. 1–29.

30. Direct mesurement of critical resolved shear stress of prismatic and basal slip in polycrystalline Ti using high energy X-ray diffraction microscopy / L. Wang [et al.] // *Acta Materialia.* – 2017. – Vol. 132. – P. 598–610.

31. Cottrell A.H. A brief view of work hardening // *Dislocations in solids.* Vol. 11. Eds. F.R.N. Nabarro, M.S. Duesbery. – Elsevier Science, 2002. – P. 7–16.

32. Ташкинов А.А., Шавшуков В.Е. Неоднородности полей деформаций в зернах поликристаллических материалов и задача Эшелби // Вестник Пермского национального исследовательского университета. Механика. – 2018. – № 1. – С. 58–72. DOI 10.15593/perm.mech/2018.1.05

33. In situ imaging of high cycle fatigue crack growth in single crystal nickel-base superalloys by synchrotron X-radiation / L. Liu, N.S. Hussein, C.J. Torbet, D.P. Kumah, R. Vlarke, T.M. Pollock, J.W. Jones // *Journal of Engineering Materials and Technology.* – 2008. – Vol. 130. – P. 021008.

34. The development of grain-orientation-dependent residual stresses in a cyclically deformed alloy / Y. Wang, H. Tian, A. Stoica, X. Wang, P. Liaw, J. Richardson // *Nature Materials.* – 2003. – Vol. 2. – P. 101–106.

## References

1. L.Mishnaevsky. Computational Mesomechanics of Composites. *John Wiley & Sons*, 2007, 276 p.

2. Multiscale Modeling and Simulation of Composite Materials and Structures. Eds. Kwon Y.W., Allen D.H., Talreja R. *Springer Science+Business Media, LLC*, 2008, 630 p.

3. Computational Methods for Microstructure-Property Relationships. Eds. Ghosh S., Dimiduk D. *Springer Science+Business Media, LLC*, 2011, 658 p. DOI 10.1007/978-1-4419-0643.

4. F.Dunne, N.Petronic. Introduction to Computational Plasticity. *Axford, Oxford University Press*, 2006, 241 p.

5. G.Cailletaud, O.Diard, F.Feyel, S.Forest. Computational crystal plasticity: from single crystal to homogenized polycrystals. *Technische Mechanik*, 2003, Band 23, Heft 2-4, pp. 130-145.

6. S. Biroscu. The deformation behaviour of hard and soft grains in RR1000 nickel-based superalloy. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering*, 2015, vol. 82, pp. 012033.

7. Y. Wang, H.Tian, A.Stoica, X.Wang, P.Liaw and J. Richardson. The development of grain-orientation dependent residual stresses in a cyclically deformed alloy. *Nature Materials*, 2003, vol 2, pp. 101-106.

8. R. Pokharel, et al. Polycrystal Plasticity: Comparison between grain-scale observations of deformation and simulations. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, 2014, vol.5, pp. 317-346.

9. Przybyla C.P., McDowell D.L. Microstructure-sensitive extreme value probabilities for high cycle fatigue of Ni-base superalloy IN100. *International Journal of Plasticity*, 2010, vol. 26, pp. 372-394.

10. Shenoy M., Zhang J., McDowell D.L. Estimating fatigue sensitivity to polycrystalline Ni-base superalloy microstructures

using a computational approach. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2007, vol. 30, pp.889-904.

11. Liu L., Hussein N.S., Torbet C.J., Kumah D.P., Vlarke R., Pollock T.M., Jones J.W. In situ imaging of high cycle fatigue crack growth in single crystal nickel-base superalloys by synchrotron X-radiation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2008, vol. 130, pp. 021008.

12. 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 Materialia*, 2012, vol, 20, pp. 2840-2854.

13. Pippan R., Gumbsch P. Multiscale modelling of plasticity and fracture by means of dislocation mechanics. *New York, Springer Wien*, 2010, 394 p

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

15. V.Shavshukov and A.Tashkinov. 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

16. Lifshitz I.M., Rosenzweig L.N. K teorii uprugikh svoystv polikristallov [On the theory of elastic properties of polycrystals]. *Zhurnal eksper. i teoreticheskoi fiziki*, 1946, vol.16, no. 11, pp.967–980.

17. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Reshenie zadach mekhaniki deformirovaniya polikristallicheskih 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

18. Trusov P.V., Volegov P.S. Crystal plasticity theories and their applications to the description of inelastic deformations of materials. Part 1: Rigid-plastic and elastoplastic theories. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2011, no. 1, pp. 5-45.
19. P.Lipinski, J.Krier et M.Berveiller. Elastoplasticite des metaux en grandes deformations: comportement global et evolution de la structure interne. *Revue Phys.*, 1990, vol.25, pp. 361-388.
20. A.Paquin, H.Sabar, M.Berveiller. Integral formulation and self-consistent modelling of elastoviscoplastic behavior of heterogeneous materials. *Archive of Applied Mechanics*, 1999, vol.69, pp. 14-35.
21. M.Berveiller, A.Zaoui. Modelling of the plastic behavior of inhomogeneous media. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 1984, vol. 106, pp. 295-298.
22. C. Schmitt, P. Lipinski and M. Berveiller. Micromechanical modelling of the elastoplastic behavior of polycrystals containing precipitates – Application to hypo- and hyper-eutectoid steels. *Int. J. Plasticity*, 1997, vol. 13, No.3, pp. 183-199.
23. G. Franz, F. Abed-Meraim, T. Ben Zineb, X. Lemoine, M. Berveiller. Strain localization analysis using a multiscale model. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 45, pp. 768–773.
24. G.Franz, F. Abed-Meraim, M.Berveiller. Strain localization analysis for single crystals and polycrystals: Towards microstructure-ductility linkage. *International Journal of Plasticity*, 2013, vol. 48, pp. 1–33.
25. Bogolubov N.N., Shirkov D.V. Kvantovye polya [Quantum fields]. Moscow, Fizmatlit, 2005, 384 p.
26. T.H.Lin. Physical theory of plasticity. *Advances in Applied Mechanics*, 1957, Vol.11, pp. 255-311.
27. T.H. Lin and S.Ribeiro. Development of a physical theory of plasticity. *Int. J. Solids Structures*, 1981, Vol.17, pp. 545-551.
28. Deformation-mechanism maps. The plasticity and Creep of Metals and Ceramics. By H.J.Frost and M.F.Ashby. *Oxford-NewYork, Pergamon Press.*, 1989, 328 p.
29. T. B. Britton, F. P. E. Dunne and A. J. Wilkinson. On the mechanistic basis of deformation at the microscale in hexagonal close-packed metals. *Proc. Roy. Soc. A*, 2015, vol.471, pp. 1- 29.
30. L.Wang et al. Direct mesurment of critical resolved shear stress of prismatic and basal slip in polycrystalline Ti using high energy X-ray diffraction microscopy. *Acta Materialia*, 2017, Vol.132, pp. 598-610.
31. A.H.Cottrel. A brief view of work hardening. In "Dislocations in solids. Vol. 11", ed. F.R.N.Nabarro and M.S.Duesbery. *Elsevier Science*, 2002, pp. 7-16
32. Tashkinov A.A., Shavshukov V.E. Inhomogeneities in grains of polycrystalline materials and eshelby problem. *PNRPU Mechanics Bulletin*, 2018, no.4, pp.58-72. DOI 10.15593/perm.mech/2018.1.05
33. Liu L., Husseini N.S., Torbet C.J., Kumah D.P., Vlarke R., Pollock T.M., Jones J.W. In situ imaging of hihd cycle fatigue crack growth in single crystal nickel-base superalloys by synchrotron X-radiation. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2008, vol. 130, pp. 021008.
34. Y.Wang, H.Tian, A.Stoica, X.Wang, P.Liaw and J.Richardson. The development of grain-orientation-dependent residual stresses in a cyclically deformed alloy. *Nature Materials*, 2003, vol. 2, pp. 101-106.