Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования
Пермский национальный исследовательский политехнический университет

На правах рукописи

Янц Антон Юрьевич

Двухуровневая математическая модель для описания неупругого деформирования поликристаллов: приложение к анализу сложного нагружения в случае больших градиентов перемещений

01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Диссертация

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель	доктор физико-математических наук, профессор Трусов Петр Валентинович

Пермь, 2016

Оглавление

Список основных сокращений

ВП – внутренние переменные

ИПД – интенсивные пластические деформации

ИТН – изображающая точка напряжений (в пространстве напряжений)

КСК – кристаллографическая система координат

ЛСК – лабораторная система координат

ОПН – образ процесса нагружения

ОС – определяющее соотношение

ПКА – поликристаллический агрегат

$ПСК_К$ – подвижная система координат, связанная с решеткой кристаллита

$ПСК_П$ – подвижная система координат, отвечающая за квазитвердое движение представительного макрообъема

СН – сложное нагружение

СС – система скольжения

УВП – упруговязкопластический

УП – упругопластический

УПП – упругопластические процессы

ФТП – физические теории пластичности

Список основных обозначений

E_u – интенсивность деформаций

$\mathrm{H}(\bullet)$ – функция Хэвисайда

K_0, K_t – отсчетная и текущая конфигурации

K^* – промежуточная разгруженная конфигурация

Q_e – норма несимметричного тензора деформаций

s – естественный параметр траектории деформации

γ^{k}, $\dot{\gamma}^{k}$ – сдвиг и скорость сдвига по системе скольжения с номером k

η, θ, λ – параметры, характеризующие точность совпадения двух ОПН с одинаковой траекторией деформаций

Σ_e – норма тензора напряжений

σ_s – предел текучести

τ_c^{k} – критическое напряжение сдвига в системе скольжения с номером k

$\mathbf{Э}$ – вектор деформаций

$\mathbf{b}$, $\mathbf{n}$ – вектор Бюргерса и нормаль плоскости скольжения дислокации

$\mathbf{D}$ – симметричный тензор скорости полных деформаций макроуровня

$\mathbf{D}^{p}$ – пластическая составляющая симметричного тензора скорости деформаций макроуровня

$\mathbf{D}^{e}$ – упругая составляющая симметричного тензора скорости деформаций макроуровня

$\mathbf{d}$ – симметричный тензор скорости полных деформаций элемента мезоуровня

$\mathbf{d}^{p}$ – пластическая составляющая симметричного тензора скорости деформаций элемента мезоуровня

$\mathbf{d}^{e}$ – упругая составляющая симметричного тензора скорости деформаций элемента мезоуровня

$\mathbf{D}', \mathbf{D}^{p\prime}, \mathbf{D}^{e\prime}, \mathbf{d}', \mathbf{d}^{p\prime}, \mathbf{d}^{e\prime}$ – симметричные девиаторы соответствующих величин

$\mathbf{E}, \mathbf{E}'$ – симметричный тензор деформаций и его девиатор

$\mathbf{e}_i$ – базис ЛСК

$\tilde{\mathbf{e}}_i$ – базис ПСК$_К$

$\bar{\mathbf{e}}_i$ – базис ПСК$_П$

$\mathbf{f}$, $\mathbf{f}^{\mathrm{e}}$, $\mathbf{f}^{\mathrm{in}}$ – «полный» (транспонированный) градиент места, его упругая и неупругая составляющие

$\mathbf{l}$, $\mathbf{l}^{\mathrm{e}}$, $\mathbf{l}^{\mathrm{in}}$ – транспонированный градиент скоростей перемещений, его упругая и неупругая составляющие

$\mathbf{m}$ – симметричный ориентационный тензор системы скольжения

$\mathbf{O}$ – ориентация ПСК$_П$ (макроуровня) относительно ЛСК

$\mathbf{o}$ – ориентация ПСК$_К$ (мезоуровня) относительно ЛСК

$\mathbf{p}^i$ – репер Френе траектории деформаций

$\mathbf{R}$ – ортогональный тензор, сопровождающий деформацию

$\mathbf{S}$ – вектор напряжений

$\mathbf{Q}$ – несимметричный тензор деформаций макроуровня

ʠ –несимметричный тензор деформаций мезоуровня

$\mathbf{q}_i, \hat{\mathbf{q}}_i$ – векторы лагранжева базиса в отсчетной и текущей конфигурациях

$\mathbf{U}$, $\mathbf{V}$ – правый и левый тензоры искажений

$\mathbf{z}$, $\mathbf{z}^{\mathrm{e}}$, $\mathbf{z}^{\mathrm{in}}$ – меры скоростей полных, упругих и неупругих деформаций

$\boldsymbol{\eta}^i$ – ортонормированный базис в пространствах $\aleph^{(9)}, \Im^{(9)}$

$\mathbf{\Pi}$ – тензор четвертого ранга упругих свойств макроуровня

$\boldsymbol{\pi}$ – тензор четвертого ранга упругих свойств элемента мезоуровня

$\boldsymbol{\rho}^i$ – ортонормированный базис в пространствах $\aleph^{(5)}, \Im^{(5)}$

$\mathbf{\Sigma}, \mathbf{\Sigma}'$ – тензор напряжений и его девиатор

$\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений мезоуровня

χ^i – параметры кривизны и кручения траектории деформаций

$\mathbf{\Omega}$ – спин макроуровня

$\boldsymbol{\omega}$ – спин мезоуровня

$\aleph^{(5)}$ $\aleph^{(9)}$ – пятимерное (девятимерное) пространство напряжений

$\Im^{(5)}$ $\Im^{(9)}$ – пятимерное (девятимерное) пространство деформаций

∇ – оператор Гамильтона, определенный в отсчетной конфигурации

$\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона, определенный в текущей конфигурации

Введение

В настоящее время в связи с постоянно растущей потребностью в совершенствовании методов обработки металлов и сплавов, придающих оптимальные физико-механические и эксплуатационные свойства, широкое распространение получили технологические процессы, реализующие интенсивные пластические деформации (ИПД). Большинство таких процессов связано с нагружением по траекториям деформаций, обладающим сложной внутренней геометрией в соответствующем пространстве.

Для описания поведения поликристаллических металлов и сплавов при сложном нагружении большинством исследователей используются макрофеноменологические модели неупругого деформирования; значительных успехов в данной области достигли многие ученые – механики (Р.А. Васин, В.Г. Зубчанинов, А.А. Ильюшин., А.Ю. Ишлинский, В.С. Ленский, А. Надаи, В.В. Новожилов, А.А. Поздеев, В. Прагер, Ю.Н. Работнов и др.). Модели данного класса базируются на установлении зависимостей между параметрами макроуровня, не углубляясь в вопросы эволюции микроструктуры материала, что приводит к усложнению операторных определяющих соотношений (ОС), в связи с чем возникают определенные трудности использования последних при решении конкретных прикладных задач. В то же время поведение поликристаллических металлов и сплавов определяется внутренней микроструктурой, которая претерпевает существенные изменения в процессах ИПД.

Постановка краевых задач, возникающих при исследовании процессов ИПД, требует построения геометрически нелинейных ОС теории пластичности. Всплеск интереса к построению определяющих соотношений для описания геометрически нелинейных процессов в случае больших пластических деформаций наблюдался в 70-х–80-х годах XX века; существенных успехов в данной области достигли многие отечественные ученые, среди которых следует отметить С.Н. Коробейникова, В.И. Левитаса, А.А. Маркина, А.А. Поздеева, А.А. Рогового, П.В. Трусова. Были предприняты многочисленные попытки построения макрофеноменологических ОС, основанные, как правило, на обобщении соответствующих геометрически линейных соотношений. В качестве базовых в большинстве случаев использовались ОС в дифференциальной форме (обычно – квазилинейные), связывающие материальную скорость изменения тензора напряжений с тензором скорости той или иной меры деформации.

В последние 15-20 лет для описания неупругого деформирования металлов и сплавов широкое распространение получил подход, основанный на многоуровневом моделировании. В большинстве известных моделей рассматриваются два масштабных уровня: макроуровень, отражающий свойства представительного макрообъема материала (или – представительного объема в инженерном смысле), и мезоуровень – уровень кристаллита. Известно, что идеальная кристаллическая решетка состоит из атомов, образующих строгую последовательность в определенных направлениях. Реальным кристаллическим материалам присуще наличие множества дефектов различных масштабов и размерностей (точечных дефектов, дислокаций, включений и т.д.), которые могут организовываться в субструктуры, испытывать движение и взаимодействовать между собой при деформировании. При этом разнообразие механизмов реализации необратимых (неупругих) деформаций в поликристаллах при нагружении также довольно широко: движение краевых и винтовых внутризеренных дислокаций, межзеренное проскальзывание, двойникование, фазовые превращения, движение точечных дефектов. Экспериментальные данные показывают, что микроструктура материалов в ходе деформирования претерпевает существенные изменения (эволюционирует), что отмечается многими отечественными (А.Н. Орлов, В.В. Рыбин, Я.Д. Вишняков, О.А. Кайбышев и др.) и зарубежными (Дж. Хирт, И. Лоте, Р. Хоникомб и др.) исследователями; при этом текущее состояние структуры мезо- и микроуровня определяет физико-механические свойства материала на макроуровне.

Построением математических моделей, описывающих эволюцию мезо- и микроструктуры в широком диапазоне термомеханических воздействий, занимались многие как отечественные (В.А. Лихачев, П.В. Макаров, В.Г. Малинин, В.Е. Панин, В.В. Рыбин др.), так и зарубежные ученые (L. Anand, R.J. Asaro, J. Bishop, P. Hill, T.G. Lin, D.L. McDowell, D. Peirce, J.R. Rice, J. Taylor и др.). Существенным преимуществом таких моделей перед макрофеноменологическими теориями является их значительная универсальность, в частности – отсутствие зависимости от сложности нагружения.

При математическом описании поведения сложных физико-механических объектов, к числу которых, несомненно, относятся поликристаллические материалы, в последние десятилетия широкое распространение получил подход к построению конститутивных моделей, основанный на введении внутренних переменных (ВП), описывающих состояние структуры материала на том или ином масштабном уровне; при этом данные переменные могут иметь как скалярную, так и тензорную природу. Для ВП записываются так называемые эволюционные уравнения, связывающие изменение данной ВП с текущими значениями других ВП и рядом параметров термомеханической природы. В рамках данного подхода предполагается, что реакция материала полностью определяется значениями тензорзначных термомеханических характеристик материала, конечного набора внутренних переменных, параметров физико-механических воздействий и их производных по времени требуемого порядка в исследуемый момент времени [72]. При построении конститутивных моделей часто возникает необходимость введения нескольких масштабных уровней, на каждом из которых формулируются определяющие соотношения и эволюционные уравнения, описывающие кинетику внутренней структуры материала на рассматриваемом уровне; при этом значения ВП в определенный момент времени количественно описывают состояние внутренней структуры. Так, например, в случае двухуровневой модели верхний (макро-) уровень представляет собой конгломерат кристаллитов, каждый из которых описывается моделью мезоуровня; внутренними переменными макроуровня являются функция распределения ориентаций, сдвиги, накопленные на системах скольжения кристаллитов, неупругая составляющая скорости изменения деформаций и др.

Основные отличия различных многоуровневых моделей заключаются в способе связи параметров и соотношений моделей различных уровней и выборе моделей, описывающих поведение элементов нижних уровней (кристаллита – в случае двухуровневой модели). По глубине физического описания различаются модели, основанные на макрофеноменологических теориях пластичности, физических теориях пластичности, а также на теориях дислокационной или молекулярной динамики. Следует отметить, что несмотря на огромное количество работ по многоуровневым физическим моделям, вопросам исследования влияния сложности нагружения в процессах ИПД в известных публикациях не уделялось должного внимания.

Актуальность темы научного исследования связана с необходимостью разработки обладающей требуемой универсальностью конститутивной модели, основанной на одной из физических теорий пластичности, пригодной для описания и анализа процессов нагружения представительного объема поликристалла при больших градиентах перемещений по траекториям с произвольной внутренней геометрией.

Целью работы является модификация двухуровневой конститутивной модели для описания неупругого деформирования поликристаллических материалов по траекториям произвольной сложности, основанной на рассмотрении эволюции внутренней микроструктуры, введении разложения движения на каждом масштабном уровне (на квазитвердое и деформационное) и несимметричных мер скорости деформации и деформации.

Задачи работы:

- разработка модификации двухуровневой математической модели для анализа неупругого деформирования моно- и поликристаллов на базе физической теории упруговязко пластичности, использующей несимметричную меру скорости изменения деформированного состояния на мезо- и макроуровнях, позволяющей описывать нагружения по траекториям произвольной сложности в терминах подвижной системы координат, введенной для описания квазитвердого движения представительного макрообъема;

- анализ способов разложения движения, вводимых явным и неявным способами, введение нового способа разложения движения на квазитвердое и деформационное на мезо- и макроуровнях, модификация условий согласования соотношений мезо- и макроуровней в случае принятия различных гипотез о разложении движения;

- установление физического смысла неголономных мер деформированного состояния мезо- и макроуровня, вычисляемых коротационным интегрированием индифферентных несимметричных мер скорости деформаций, определяемых градиентами соответствующих относительных скоростей перемещений;

- модификация основных понятий и определений теории упругопластических процессов (векторы напряжений и деформаций, образ процесса нагружения, постулат изотропии) для случая несимметричных мер деформаций и больших градиентов перемещений;

- применение двухуровневой модели для физического обоснования основных постулатов теории А.А. Ильюшина и наблюдаемых в экспериментах эффектов сложного нагружения (постулат изотропии в частной форме, запаздывание векторных и скалярных свойств и пр.);

- реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов по произвольному жесткому нагружению представительного макрообъема поликристалла.

Научная новизна заключается:

- в модификации двухуровневой конститутивной модели, основанной на физической теории упруговязкопластичности, использующей несимметричные меры скорости изменения деформированного состояния и деформации, новом способе разложения движения на квазитвердое и деформационное на мезо- и макроуровне;

- в обосновании необходимости для случая больших градиентов перемещений определения образа процесса нагружения и реализации нагружения в терминах подвижной системы координат, связанной с материалом;

- в модификации способа построения образа процесса нагружения в терминах подвижной системы координат; в доказательстве независимости получаемого образа процесса от выбора системы отсчета и обобщении указанных понятий и определений на случай больших градиентов перемещений, базирующихся на введенном способе разложения движения на квазитвердое и деформационное;

- в определении программы нагружения в терминах лабораторной системы координат (испытательной машины) по предписанной траектории нагружения в терминах подвижной системы координат;

- в применении модели для физического объяснения эффектов сложного нагружения.

Практическая значимость работы заключается:

- в возможности применения разработанной модели для анализа процессов нагружения поликристаллических материалов по произвольным траекториям деформаций (в том числе – при больших градиентах перемещений), задаваемых в терминах подвижной системы координат, с использованием машин сложного нагружения;

- в разработке комплекса проблемно-ориентированных программ для ЭВМ с применением современных технологий параллельных вычислений для проведения численных экспериментов по нагружению представительного объема поликристаллического материала по произвольным траекториям и в возможности его применения для решения фундаментальных и прикладных проблем механики деформируемого твердого тела (получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ №2011611840, №2013619701[10,83]).

Методология и методы диссертационного исследования

Теоретическую и методологическую основу диссертационного исследования составляют научные труды и разработки зарубежных и отечественных ученых в области моделирования процессов неупругого моделирования поликристаллических металлов и сплавов.

Исследования выполнялись на основе конститутивного подхода, базирующегося на одной из физических теорий пластичности, использующей явное рассмотрение эволюции внутренней структуры материала. Численные эксперименты проводились с помощью методов компьютерного программирования с использованием технологий параллельных вычислений.

<u>На защиту выносятся:</u>

- модификация двухуровневой упруговязкопластической модели для описания деформирования представительного объема поликристаллического материала;

- гипотезы о разложении движения на макро- и мезоуровнях на квазитвердое и деформационное;

- определение физического смысла неголономных мер деформированного состояния мезо- и макроуровня;

- алгоритм реализации произвольного нагружения в терминах введенной подвижной системы координат, в случае больших градиентов перемещений;

- результаты численного моделирования процессов нагружения по траекториям различной степени сложности в случае больших и малых градиентов перемещений, физическое объяснение некоторых эффектов сложного нагружения;

- оценка точности выполнения постулата изотропии А.А. Ильюшина в случае больших градиентов перемещений.

<u>Достоверность</u> подтверждена удовлетворительными результатами оценки сходимости и устойчивости решения в серии численных экспериментов, удовлетворительным соответствием результатов численных расчетов экспериментальным данным для случая малых градиентов перемещений при реализации нагружения в терминах лабораторной системы координат для траекторий малой и средней кривизны и траекторий с изломами.

<u>Апробация работы.</u> Основные результаты, представленные в диссертационной работе, докладывались и обсуждались на XIX – XXIV Всероссийских школах-конференциях молодых ученых «Математическое моделирование в естественных науках» (Пермь, 2010-2015 гг.), конференциях молодых ученых «Неравновесные процессы в сплошных средах» (Пермь, 2011-2013 гг.), Международных молодежных научных конференциях «XXXVIII–XXXIX Гагаринские чтения» (Москва, 2012, 2013 гг.), Всероссийской научной конференции молодых ученых с международным участием «Перспективные материалы в технике и строительстве» (Томск, 2013 г.), Всероссийской научной конференции молодых ученых с международным участием «Перспективные материалы в строительстве и технике» (Томск, 2014 г.), «XVIII–XIX Зимних школах по механике сплошных сред» (Пермь, 2013, 2015 гг.), «Высокие технологии в современной науке и технике» (Томск, 2013-2014 гг.), VIII Российской научно технической конференции «Механика, ресурс и диагностика материалов и конструкций» (Екатеринбург, 2014), XXI Петербургских чтениях по проблемам прочности «К 100-летию со дня рождения Л.М. Качанова и Ю.Н. Работнова» (Санкт-Петербург, 2014), International Workshop "Failure of Heterogeneous Materials under Intensive Loading: Experiment and Multi-scale Modeling" (Perm, 2014). Работа полностью докладывалась и обсуждалась на семинарах Института механики сплошных сред УрО РАН (рук. академик РАН В.П. Матвеенко), кафедры математического моделирования систем и процессов ПНИПУ (рук. проф. П.В. Трусов), кафедры механики композиционных материалов и конструкций ПНИПУ (рук. проф. Ю. В. Соколкин).

Личный вклад автора – постановка задачи (совместно с научным руководителем), модификация двухуровневой конститутивной модели, разработка и реализация программ на ЭВМ, проведение вычислений, анализ результатов.

Глава 1. Основные понятия и постулаты теории упругопластических процессов А.А. Ильюшина

При математическом описании процессов сложного нагружения и интерпретации результатов экспериментов и теоретических расчетов широкое распространение получила теория упругопластических процессов (УПП) А.А. Ильюшина [25,26]. Им было введено векторное представление процесса деформирования, согласно которому компоненты тензоров напряжений и деформаций однозначно связаны с векторами в совмещенном пятимерном евклидовом пространстве; траектории деформации описываются годографом соответствующего вектора. Применение аппарата дифференциальной геометрии к траекториям в соответствующих пространствах позволило выделить ряд параметров, характеризующих вид напряженно-деформированного состояния и позволяющих классифицировать процессы нагружения по их сложности. Стоит отметить, что предложение представления тензора деформаций в виде девятимерного вектора принадлежит В. Прагеру [54], однако до появления теории А.А. Ильюшина оно не имело широкого распространения. При этом в силу симметрии используемых мер напряженного и деформированного состояния и изохоричности процесса пластического деформирования размерность пространства деформаций (напряжений) может быть уменьшена до пяти. В работе [25] отмечается, что редуцирование пространства до пятимерного подпространства позволяет детально охарактеризовать процессы неупругого деформирования.

1.1. Основные положения теории А.А. Ильюшина

Введем, следуя [26], евклидовы пятимерные пространства напряжений $\aleph^{(5)}$ и деформаций $\mathfrak{I}^{(5)}$ с общим ортонормированным базисом $\boldsymbol{\rho}^i$, $i = 1\ldots5$. Как отмечено выше, в теории устанавливается взаимно однозначное соответствие между тензорами (девиаторами) деформаций и напряжений и векторами в соответствующих пространствах. Компоненты вектора деформаций связаны с компонентами девиатора деформаций линейными соотношениями, например, следующего вида:

$$
\begin{aligned}
&Э_1 = \sqrt{4/3}\mathrm{E}'_{11}\cos\ \alpha\ \pm\sqrt{4/3}\mathrm{E}'_{22}\sin\ \alpha \pm {}^{\pi}\!/_{6}\ ,\\
&Э_2 = \sqrt{4/3}\mathrm{E}'_{11}\sin\ \alpha\ \mp\sqrt{4/3}\mathrm{E}'_{22}\cos\ \alpha \pm {}^{\pi}\!/_{6}\ ,\\
&Э_3 = \sqrt{2/3}\mathrm{E}'_{12},\ Э_4 = \sqrt{2/3}\mathrm{E}'_{23},\ Э_5 = \sqrt{2/3}\mathrm{E}'_{31},
\end{aligned}
\tag{1.1}
$$

где E'_{ij} $i, j = 1\ldots3$ – компоненты девиатора деформаций, $\mathbf{E}' = dev\ \mathbf{E}$, α – произвольный параметр, который определяет угол поворота вектора **Э** вокруг оси, перпендикулярной гиперплоскости $\boldsymbol{\rho}^1\boldsymbol{\rho}^2$. С использованием соотношений (1.1) можно показать, что модуль вектора деформаций $|\mathbf{Э}|$ равен интенсивности деформаций E_u:

$$
\sqrt{\mathbf{Э}\cdot\mathbf{Э}} = |\mathbf{Э}| = \mathrm{E}_u = \sqrt{\frac{2}{3}\mathbf{E}' : \mathbf{E}'^{\mathrm{T}}},
\tag{1.2}
$$

где **Э**– вектор деформаций в пространстве $\aleph^{(5)}$:

$$
\mathbf{Э} = \sum_{i=1}^{5} Э_i \boldsymbol{\rho}^i.
\tag{1.3}
$$

Конец вектора **Э** описывает в пространстве $\aleph^{(5)}$ непрерывную кривую, которая называется траекторией деформации. Далее вводится естественный параметр кривой траектории деформации, характеризующий длину кривой от начального до текущего момента:

$$
\mathrm{s}\ t\ = \int_0^t \sqrt{\frac{\mathrm{d}\mathbf{Э}}{\mathrm{dt}}\cdot\frac{\mathrm{d}\mathbf{Э}}{\mathrm{dt}}}\,\mathrm{d}\tau.
\tag{1.4}
$$

Теперь, зная зависимость траектории нагружения от естественного параметра $\mathbf{Э}\ \mathrm{s}$ и предполагая требуемую гладкость последней, в каждой точке траектории можно построить естественный пятимерный ортонормированный репер Френе $\mathbf{p}_i$, $i = 1\ldots5$ [45], при этом траектория в окрестности ее произвольной точки полностью определяется единственным естественным репером и характеризуется четырьмя параметрами кривизны и кручения χ^i, $i = 1\ldots4$ [25, 26]. Рекуррентные соотношения для векторов естественного репера и параметров кривизны известны из дифференциальной геометрии:

$$\frac{d\mathbf{p}_n}{d\mathrm{s}} = -\chi_{n-1}\mathbf{p}_{n-1} + \chi_n\mathbf{p}_{n+1},$$
$$\chi_n^2 = -\chi_{n-1}^2 + \left(\frac{d\mathbf{p}_n}{d\mathrm{s}}\right)^2, \; n = 1\ldots5, \tag{1.5}$$
$$\chi_0 \equiv \chi_5 = 0,$$

где первый вектор репера является касательным к траектории: $\mathbf{p}_1 = \frac{d\mathbf{Э}}{d\mathrm{s}}$, $\chi_1 \cdots \chi_4$ – параметры кривизны и кручения траектории, характеризующие внутреннюю геометрию кривой. При этом зависимости:

$$\chi_1 = \chi_1 \; \mathrm{s} \; ,\ldots, \chi_4 = \chi_4 \; \mathrm{s} \tag{1.6}$$

и соотношение для длины траектории (1.4) называются естественными уравнениями траектории деформации; очевидно, что траектории, обладающие одинаковой внутренней геометрией, имеют одинаковые естественные уравнения (1.6).

Стоит отметить, что пространство деформаций, в котором могут быть реализованы натурные эксперименты, ограничено размерностью три [36,40], поэтому в экспериментальных исследованиях рассматривают не более трех векторов из естественного репера и двух первых параметров кривизны. Величина $\chi_1 = 1/\mathrm{R}_1$ является главной кривизной траектории в некоторой точке, где R_1 – главный радиус кривизны; например, для плоской траектории в виде дуги окружности параметр R_1 в точности равен радиусу этой окружности. Параметр χ_2 характеризует вращение вектора бинормали $\mathbf{p}_3$ вокруг вектора касательной к траектории $\mathbf{p}_1$, поэтому называется параметром кручения траектории.

Аналогичным образом в пространстве напряжений $\mathfrak{I}^{(5)}$ с базисом $\boldsymbol{\rho}^i$, $i = 1\ldots5$ можно ввести *вектор напряжений*:

$$\mathbf{S} = \sum_{i=1}^{5} \mathrm{S}_i \boldsymbol{\rho}^i, \tag{1.7}$$

компоненты которого однозначно связаны с девиатором напряжений $\boldsymbol{\Sigma}' = dev \;\; \boldsymbol{\Sigma}$:

$$
\begin{aligned}
&S_1 = \sqrt{3}\Sigma'_{11}\cos\left(\alpha \pm \sqrt{3}\Sigma'_{22}\sin\left(\alpha \pm \pi/6\right)\right),\\
&S_2 = \sqrt{3}\Sigma'_{11}\sin\left(\alpha \mp \sqrt{3}\Sigma'_{22}\cos\left(\alpha \pm \pi/6\right)\right),\\
&S_3 = \sqrt{3/2}\Sigma'_{12},\ S_4 = \sqrt{3/2}\Sigma'_{23},\ S_5 = \sqrt{3/2}\Sigma'_{31}.
\end{aligned}
\tag{1.8}
$$

Угол α в (1.1) и (1.8) должен иметь одно и то же значение, неизменное для рассматриваемого процесса нагружения. При этом стоит отметить, что при наличии у пространств $\mathfrak{I}^{(5)}$ и $\boldsymbol{\aleph}^{(5)}$ общего базиса $\boldsymbol{\rho}^i$ сами эти пространства, вообще говоря, различны. Однако, если наложить пространство напряжений на пространство деформаций при сохранении общего базиса $\boldsymbol{\rho}^i$ и к каждой точке траектории деформаций отнести вектор напряжений и ряд других термомеханических характеристик, получим так называемый *образ процесса нагружения* (ОПН). В качестве примера на рисунке 1.1 представлены образы процессов нагружения по двумерным траекториям с изломом, состоящих из двух этапов: первая траектория – деформирование вдоль оси $Э_1$ до 2% и вдоль оси $Э_3$ до 1.2%, вторая – деформирование вдоль оси $Э_3$ до 2% и вдоль оси $Э_1$ до 1.2%. На рисунке приведены обозначения векторов напряжений **S** и деформаций **Э**, траектории деформации, а также угла β между касательной к траектории и вектором напряжений. До излома траектории данный угол имеет значение, близкое к 0°, в момент излома значение близко к величине угла излома траектории (90°), а после излома значение β постепенно стремится к 0°.

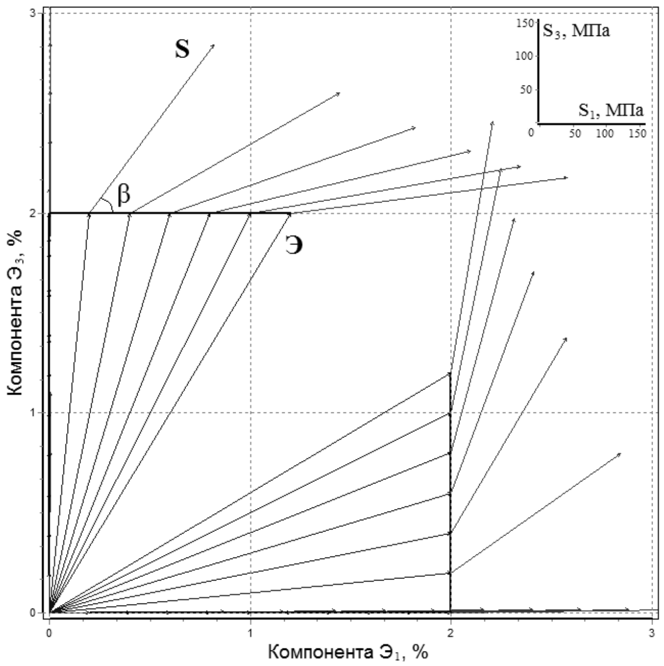

Рис. 1.1.Образы процессов нагружения для двумерных траекторий (в плоскости $Э_1Э_3$) с изломом

1.2. Модификация основных положений теории А.А. Ильюшина в случае использования несимметричных мер

Напомним, что исходная теория А.А. Ильюшина для определения образа процесса нагружения использует соответствие девиаторов симметричных мер напряженного и деформированного состояний пятимерным векторам в соответствующих пространствах. Однако в случае использования в качестве мер несимметричных тензоров необходимо введение восьмимерных пространств, если первые инварианты мер отвечают за изменение объема и среднего давления, и девятимерных – в противном или более общем случае [67]. В дальнейшем меры напряжений $\mathbf{\Sigma}$ и деформаций $\mathbf{Q}$ полагаются несимметричными тензорами 2-го ранга; обоснование целесообразности применения таких мер представлены в разделе 3.4.

Введем евклидовы девятимерные пространства напряжений $\mathfrak{I}^{(9)}$ и деформаций $\aleph^{(9)}$ с общим ортонормированным базисом $\boldsymbol{\eta}^i$, $i = 1\ldots9$, и соотношения, связывающие компоненты мер напряженного и деформированного состояний с векторами в соответствующих девятимерных пространствах напряжений и деформаций. Компоненты 9-мерного вектора деформаций связаны с компонентами тензора деформаций соотношением равенства соответствующих компонент:

$$Э_i \;=\; Q_{11}, Q_{22}, Q_{33}, Q_{12}, Q_{23}, Q_{13}, Q_{21}, Q_{32}, Q_{31} \;^{\mathrm{T}}. \qquad (1.9)$$

В качестве аналога интенсивности деформаций используется евклидова норма: $\mathrm{Q_e} = \sqrt{\mathbf{Q}:\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}}$; при этом, очевидно, выполняется:

$$\left|\mathbf{Э}\right|^2 = \mathbf{Э}\cdot\mathbf{Э} = Q_e^2 = \mathbf{Q}:\mathbf{Q}^{\mathrm{T}} = Q_{11}^2 + Q_{22}^2 + Q_{33}^2 + Q_{12}^2 + Q_{21}^2 + Q_{13}^2 + Q_{31}^2 + Q_{23}^2 + Q_{32}^2. \qquad (1.10)$$

Отдельного внимания заслуживает определение связи компонент вектора напряжений с компонентами соответствующего тензора. Тензор напряжений Коши макроуровня является симметричным в силу симметричности внутри пар индексов компонент тензора упругих свойств. Симметричность тензора упругих характеристик связана, во-первых, с отсутствием подтверждений возможной несимметрии напряжений в экспериментах, во-вторых, с рассмотрением процессов нагружения совокупности кристаллитов с решеткой высшей степени симметрии (ОЦК и ГЦК). При этом для решеток более низкой степени симметрии вопрос о симметричности тензора упругих свойств требует отдельного рассмотрения.

Связь компонент должна быть такой, что в случае одноосного нагружения (растяжения/сжатия) длина вектора в точности равна значению (по модулю) отличной от нуля компоненты $\pm\sigma$. В случае чистого сдвига отличными от нуля будут две недиагональных компоненты, значение которых $\pm\tau$; соответствующая длина вектора напряжений должна быть равна τ. В связи с этим компоненты вектора напряжений определяются в виде:

$$\mathrm{S}_i \;=\left\{\Sigma_{11}, \Sigma_{22}, \Sigma_{33}, \frac{\Sigma_{12}}{\sqrt{2}}, \frac{\Sigma_{23}}{\sqrt{2}}, \frac{\Sigma_{13}}{\sqrt{2}}, \frac{\Sigma_{21}}{\sqrt{2}}, \frac{\Sigma_{32}}{\sqrt{2}}, \frac{\Sigma_{31}}{\sqrt{2}}\right\}^{\mathrm{T}}. \qquad (1.11)$$

Длина вектора напряжений равна эффективному напряжению, определяемому соотношением:

$$\left|\mathbf{S}\right|^2 = \mathbf{S}\cdot\mathbf{S} = \Sigma_e^2 = \Sigma_{11}^2 + \Sigma_{22}^2 + \Sigma_{33}^2 + \frac{1}{2}\;\Sigma_{12}^2 + \Sigma_{21}^2 + \Sigma_{13}^2 + \Sigma_{31}^2 + \Sigma_{23}^2 + \Sigma_{32}^2\;. \qquad (1.12)$$

Введенные векторы должны быть непрерывными функциями (вместе с производными требуемого порядка) времени или неубывающего параметра нагружения (например, длины траектории деформации), дифференцированием которых по времени можно определить производные мер напряженного и деформированного состояний. По компонентам векторов деформаций и напряжений (1.9) и (1.11) строятся образы процесса нагружения в совмещенном пространстве деформаций и напряжений $\aleph^{(9)}$. Наряду с векторами, ассоциированными с компонентами мер напряжений и деформаций, вводят векторы $\dot{\mathbf{S}}$ и $\dot{\mathbf{Э}}$ [22, 23], компоненты которых связаны с соответствующими мерами скоростей изменения напряжений и деформаций соотношениями, аналогичным (1.9) и (1.11).

1.3. Постулат изотропии и краткий обзор экспериментальных работ по сложному нагружению

Для изотропных материалов А.А. Ильюшиным был выдвинут, а позднее подтвержден многими экспериментальными работами[1, 2, 19 – 21, 33 – 36], *постулат изотропии (в частной форме)*, утверждающий, что в каждой точке траектории нагружения ориентация вектора напряжений функционально и непрерывно зависит только от геометрических χ_i s и кинетических $\dot{\chi}_i$ s характеристик предшествующей траектории деформации. Важным следствием, получившим широкое практическое применение, является инвариантность образа процесса нагружения (ОПН) начально изотропного материала для траекторий, имеющих одинаковую внутреннюю геометрию. При этом одинаковую внутреннюю геометрию имеют траектории, совмещаемые в каждой точке путем вращения и/или отражения в пространстве деформаций $\aleph^{(5)}$. Стоит отметить, что ортогональные преобразования осей координат в трехмерном пространстве, в котором определяются значения компонент тензоров, также входят в группу преобразований, сохраняющих внутреннюю геометрию траектории нагружения.

С конца 50-х годов прошлого века было проведено множество натурных экспериментов, интерпретированных с помощью теории УПП, с целью выявления закономерностей эволюции векторных и скалярных характеристик процессов деформирования при сложном нагружении материалов. Эксперименты проводились на широком спектре материалов, от меди и дюралюминия до различных сталей. Траектории представляли собой разнообразные комбинации этапов нагружения по лучевым участкам и участкам разной кривизны (например, дугам окружностей); переходы между этапами нагружения осуществлялись как посредством излома траектории, так и плавно – при совпадении касательных к участкам траекторий в точках перехода. Из анализа множества экспериментальных данных были выведены некоторые общие для поликристаллических металлов закономерности.

Большинство экспериментов по сложному нагружению проводились на двумерных траекториях с одной и более точками излома. Часть работ была посвящена исследованию скалярных свойств в окрестности траектории деформации, следующей после точки излома; так, в работах [18, 33, 35] было показано, что падение интенсивности напряжений в окрестности точки излома траектории нагружения («нырок» интенсивности напряжений) пропорционально углу (в диапазоне [0, 90^{o}]) излома и достигает максимума (порядка 10% от значения в момент излома) при 90°, в некоторых случаях было выявлено падение на 15%. При этом отмечается, что при наличии у материала площадки текучести максимальное падение интенсивности напряжений составляет 2…3%. Также было показано, что после нырка при дальнейшем монотонном нагружении интенсивность напряжений приближается к значениям, достигаемым при простом нагружении, но не превышают их. Значительный интерес проявляли исследователи также к циклическому сложному нагружению, осуществляющемуся по замкнутым траекториям с разнообразной внутренней геометрией (см. например [24, 94, 99]).

Значительная часть работ была посвящена исследованию векторных свойств материалов, в частности – эффекта запаздывания после точки излома [34, 35]. В работах [31, 32] получена экспоненциальная зависимость скорости восстановления угла между вектором напряжений и касательной к траектории деформации от длины дуги после излома.

Как отмечалось выше, траектории нагружения имеют размерность не выше трех, что связано с наличием у современного экспериментального оборудования не более трех степеней свободы для реализации нагружения, из чего следует невозможность проведения натурных экспериментов в пространствах деформаций размерности четыре и выше [36,40]. Натурные эксперименты по нагружению по трехмерным траекториям производились с помощью машин сложного нагружения (СН)[6] на трубчатых образцах [1, 2, 19, 20, 40], при этом нагружение осуществлялось продольным сжатием/растяжением, кручением и внутренним давлением.

Стоит отметить, что типичные интенсивности деформаций, достигаемые в натурных экспериментах при сложном нагружении, составляют порядка 5–10%; максимальные достигнутые интенсивности сдвиговых деформаций не превышают значения порядка 5% [3, 7, 8, 40], что связано с потерей устойчивости и однородности НДС нагружаемых образцов. Существуют программы нагружения трубчатых образцов, позволяющие сохранить устойчивое поведение образца при интенсивности сдвиговых деформаций вплоть до 20-30%, основанные на одновременном кручении и повышении внутреннего давления [4], однако реализуемые при этом процессы нагружения близки к простым. Таким образом, в натурном эксперименте отсутствует возможность реализации произвольного сложного нагружения до деформаций по любой компоненте свыше 5%.

Выполнение постулата изотропии подразумевает инвариантность образа процесса нагружения к преобразованиям вращения и отражения в совмещенном пространстве напряжений–деформаций. Для определения степени точности выполнения постулата требуются некоторые количественные оценки. При анализе экспериментальных данных обычно используется сопоставление графиков проекций траекторий деформации и векторов напряжений на некоторые гиперплоскости в совмещенном пространстве напряжений–деформаций и сопоставление значений углов между вектором напряжений и касательной к траектории деформации и величин векторов напряжений в характерных точках сравниваемых образов процесса нагружения. Получаемая при теоретическом анализе информация, доступная для построения ОПН, является значительно более обширной, что дает возможность для более детального сравнения получаемых образов процессов нагружения.

Рассмотрим вопрос о количественной оценке выполнения постулата изотропии. Под количественной оценкой будет пониматься степень близости (по рассмотренным ниже характеристикам) образов процессов при совмещении ортогональным преобразованием траекторий деформации двух процессов нагружения, имеющих идентичную внутреннюю геометрию. В силу последнего, траектории деформаций в точности совпадают при совмещении, поэтому точность выполнения постулата определяется только различием векторов напряжений $\mathbf{S}_1$, $\mathbf{S}_2$ двух сравниваемых процессов (1 и 2) после совмещения траекторий деформаций. Для количественной оценки выполнения постулата изотропии потребовалось введение некоторых дополнительных параметров, характеризующих точность его выполнения. Стоит отметить, что введение параметров производится для ОПН, определенных в девятимерном совмещенном пространстве (1.9), однако данные параметры применимы к ОПН в пространствах любой другой размерности.

Следуя классической теории [23,26], введем для траектории деформирования ортонормированный репер Френе $\mathbf{p}_i$, $i=\overline{1,9}$ в пространстве $\aleph^{(9)}$, ориентация которого изменяется от точки к точке траектории, полученной после совмещения образов процессов. Векторы $\mathbf{p}_k$ связаны с производными $\dfrac{\mathrm{d}\mathbf{Э}^k}{\mathrm{d}^k\mathrm{s}}$ процедурой ортогонализации и нормировки, где $\mathrm{s}\in 0,\mathrm{s}_{\max}$ – длина дуги (натуральный параметр кривой), которая определяется соотношением (1.4).

В качестве мер для оценки точности выполнения постулата были выбраны: максимальный (отнесенный к пределу текучести) модуль разности длин векторов напряжений на рассматриваемом участке траектории деформации:

$$\eta=\frac{1}{\sigma_{\mathrm{T}}}\max_{\mathrm{s}\in 0,\mathrm{s}_{\max}}\left\|\left\|\mathbf{S}_2(\mathrm{s})\right\|-\left\|\mathbf{S}_1(\mathrm{s})\right\|\right\| \qquad (1.13)$$

и параметр угла разориентации векторов напряжений:

$$\theta=\max_{\mathrm{s}\in 0,\mathrm{s}_{\max}}\left\{\sum_{i=1}^{9}\left|\arccos\left(\frac{\mathbf{S}_2(\mathrm{s})}{\left\|\mathbf{S}_2(\mathrm{s})\right\|}\cdot\mathbf{p}_i(\mathrm{s})\right)-\arccos\left(\frac{\mathbf{S}_1(\mathrm{s})}{\left\|\mathbf{S}_1(\mathrm{s})\right\|}\cdot\mathbf{p}_i(\mathrm{s})\right)\right|\right\}, \qquad (1.14)$$

характеризующий максимальное значение суммы модулей разностей углов между векторами напряжений и векторами репера Френе; индексы 1 и 2 означают принадлежность к сравниваемым процессам нагружения, $\|\bullet\|$ – евклидова норма, характеризующая длину вектора, все векторные величины по умолчанию зависят от параметра s.

Наряду с оценкой по чебышевской норме, целесообразно ввести интегральные параметры, характеризующие средние значения отклонений интенсивностей напряжений и относительные ориентации векторов напряжений:

$$\bar{\eta} = \frac{1}{\mathrm{s}_{\max}\sigma_{\mathrm{T}}} \int_{0}^{\mathrm{s}_{\max}} \Big| \|\mathbf{S}_2(\mathrm{s})\| - \|\mathbf{S}_1(\mathrm{s})\| \Big| \mathrm{ds} \tag{1.15}$$

и

$$\bar{\theta} = \frac{1}{\mathrm{s}_{\max}} \int_{0}^{\mathrm{s}_{\max}} \sum_{i=1}^{9} \left| \arccos\left(\frac{\mathbf{S}_2(\mathrm{s})}{\|\mathbf{S}_2(\mathrm{s})\|} \cdot \mathbf{p}_i(\mathrm{s}) \right) - \arccos\left(\frac{\mathbf{S}_1(\mathrm{s})}{\|\mathbf{S}_1(\mathrm{s})\|} \cdot \mathbf{p}_i(\mathrm{s}) \right) \right| \mathrm{ds}. \tag{1.16}$$

В подавляющем большинстве численных экспериментов траектории деформаций имеют размерность значительно ниже девяти, что связано с необходимостью соотнесения результатов моделирования с данными натурных экспериментов, в которых размерность траектории не превышает трех. При этом пространство, содержащее вектор напряжений, может иметь размерность выше размерности траектории деформирования; для оценки данного отклонения необходимо введение подпространства в пространстве $\aleph^{(9)}$, содержащего траекторию деформирования. Введем подпространство $\aleph_{\mathrm{p}}^{(k)}$, содержащее в себе траекторию деформирования размерности k (двух совмещенных траекторий с одинаковой внутренней геометрией), где k – число определяемых по траектории ненулевых векторов Френе (или размерность траектории деформирования). Допустим, что вектор напряжений $\mathbf{S}$ в некотором процессе нагружения имеет размерность l $k < l \leq 9$, тогда задача определения меры отклонения вектора напряжений от подпространства траектории деформаций сводится к поиску элемента наилучшего приближения $\mathbf{S}^{k}$ в пространстве $\aleph_{\mathrm{p}}^{(k)}$; элемент наилучшего приближения в случае конечномерных евклидовых пространств существует всегда [11]. Тогда параметр:

$$\lambda = \frac{1}{\sigma_{\mathrm{T}}} \max_{s \in [0, s_{\max}]} \left\| \mathbf{S}(s) - \mathbf{S}^k(s) \right\| , \tag{1.17}$$

будет характеризовать максимальное значение нормы невязки вектора напряжений и его наилучшего приближения в подпространстве траектории деформаций. Введенный параметр позволяет оценить точность выполнения следствия из гипотезы локальной определимости В.С. Ленского [23, 26, 33], согласно которой вектор напряжений должен при любых изменениях траектории деформации стремиться расположиться в подпространстве размерности траектории деформации. Среднее значение параметра λ определяется как

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{s_{\max}\sigma_{\mathrm{T}}} \int_0^{s_{\max}} \left\| \mathbf{S}(s) - \mathbf{S}^k(s) \right\| ds. \tag{1.18}$$

Отметим, что введенные параметры (1.17) – (1.18)вычисляются для каждого процесса нагружения в отдельности, а не для двух процессов с одинаковой внутренней геометрией в отличие от параметров (1.13) –(1.16).

1.4. Краткий обзор основных теорий пластичности

Как отмечалось выше, при проведении натурных экспериментов существует ряд ограничений (по интенсивности деформаций и размерности траектории), связанных с потерей устойчивости образцов. Данное обстоятельство является одной из основных сложностей экспериментального исследования поведения материалов при сложном нагружении в случае больших градиентов перемещений, которая не разрешена до настоящего времени. Другой немаловажной проблемой экспериментального исследования является высокая стоимость и сложность постановки каждого эксперимента, производимого для конкретного материала и конкретного процесса нагружения, учитывая, что для каждого нагружения требуются серии таких экспериментов (не менее трех). Существуют также вопросы, связанные с масштабным фактором и влиянием поверхностных эффектов. В связи с этим возникает необходимость разработки теорий пластичности, которые могли бы служить для адекватного описания исследуемых процессов, включая области изменения параметров воздействия, не достижимые в опытах по однородному деформированию образцов.

Построение математических моделей, позволяющих описывать поведение материала в условиях пластического деформирования, началось еще в первых десятилетиях XX века, при этом значительная часть известных теорий пластичности была представлена зарубежными исследователями [12, 13, 44, 47, 48, 77, 110, 131, 132, 133, 145] и основана на некоторых квазилинейных соотношениях между производными и значениями девиаторов напряжений и деформаций, а также соотношениях между их скалярными характеристиками – инвариантами [26,112]. Различные модификации теории пластического течения, предусматривающие наличие остаточных микронапряжений, характеризующих движение поверхности текучести, были разработаны как отечественными (А.Ю. Ишлинский, Ю.И. Кадашевич, В.В. Новожилов, Ю.Н. Работнов) [27, 49, 50, 55,56], так и зарубежными учеными [5, 81,86]. В работе [126] была предложена многоповерхностная теория пластичности. Отдельно стоит отметить класс моделей, основанных на эндохронной теории пластичности [28, 46, 89, 142, 143, 148], отличительной чертой которой является отказ от базового понятия предшествующих моделей – понятия поверхности текучести, – и введение так называемого внутреннего времени.

Начиная с 60-х годов XX века среди отечественных исследователей широкое распространение получила теория упругопластических процессов (УПП) и её модификации для частных случаев нагружения. Общая теория УПП [26] (см. п.1.1) базируется на ряде постулатов и гипотез [22, 26] и полученных из них соотношениях для четырех векторных и одного скалярного функционала, описывающих состояние материала; векторные функционалы описывают направление вектора напряжений **S** относительно репера Френе траектории деформации, скалярный – интенсивность напряжений (длину вектора **S**). Очевидно, что каждый из пяти функционалов, зависящий, вообще говоря, и от состояния в текущий момент, и от предшествующей истории изменения напряжений, деформаций, температуры и т.д., и от материала, требует идентификации на множестве траекторий деформирования мощности континуум даже в случае принятия постулата изотропии. Для некоторых частных случаев, когда справедливы дополнительные гипотезы, примером которых могут служить гипотеза компланарности [26, 36] и гипотеза локальной определимости В.С. Ленского [17, 33], соотношения теории УПП принимают более простой вид. Так, были получены теории малых упругопластических деформаций (А.А. Ильюшин), для траекторий в виде двухзвенных ломаных (А.А. Ильюшин, В.С. Ленский, Р.А. Васин), для траекторий малой кривизны (А.А. Ильюшин), средней кривизны (в основном разработана В.И. Малым [41, 42]). Указанные теории УПП получили широкое распространение для исследования частных случаев нагружения конкретных материалов по траекториям деформаций с определенной внутренней геометрией, но не решили основной проблемы, свойственной подавляющему большинству макрофеноменологических моделей, связанной со сложностью идентификации входящих в них функционалов, так или иначе отражающих эволюцию внутренней структуры материала.

Стоит отметить, что появление новых теорий для описания поведения материалов при пластическом деформировании и модификация существующих моделей вызвано постоянно повышающимися требованиями к адекватности моделей, особенно – в части описания одного из основных свойств металлов – свойства памяти. В классической теории пластического течения учет предыстории деформации реализуется только через скалярную величину изотропного упрочнения (обычно – радиус поверхности текучести Мизеса) и радиус-вектор, определяющий положение геометрического центра поверхности текучести. В теориях, основанных на теории пластического течения, улучшение описания памяти производится преимущественно путем модификации и усложнения законов упрочнения, которые отражают эволюцию поверхности текучести – её движение и изменение формы. Основу различных модификаций теории упругопластических процессов составляют функционалы, описывающие векторные и скалярные свойства процесса нагружения и записываемые в сложном операторном виде, необходимом для учета свойства памяти. В эндохронной теории пластичности данное свойство также описывается с помощью функциональных зависимостей параметров отклика материала от характеристик воздействия, записанных в терминах внутреннего времени.

Таким образом, макрофеноменологические модели обладают рядом недостатков: с одной стороны, часть таких теорий (в особенности – классическая теория пластического течения)практически не учитывает одно из основных свойств металлов и сплавов – свойство памяти, с другой стороны, теории, которые учитывают это свойство, записываются в виде сложных операторных уравнений, анализ физического смысла которых весьма затруднен. При этом все макрофеноменологические теории требуют проведения ресурсоемких экспериментов, по сложности близких к реализуемым в технологических процессах. В связи с этим большинство таких теорий ориентированы на узкий класс материалов и процессов, выделяемых по виду и интенсивности термомеханических воздействий, в частности, по сложности траектории нагружения и величинам градиентов перемещений.

Широкое распространение в настоящее время получил класс конститутивных моделей, основанных на введении внутренних переменных и физических теориях пластичности (ФТП), существенным образом отличающихся от макрофеноменологических теорий отсутствием сложных операторных зависимостей [64, 74, 78, 87, 92, 93, 95,122, 129, 130,135]. В основе физических теорий пластичности лежит введение параметров, отражающих состояние внутренней микроструктуры материала, а также эволюционных соотношений для данных параметров, описывающих реальные процессы, протекающие в материале, что позволяет существенно повысить универсальность таких моделей для целых классов материалов.

Глава 2. Двухуровневые физические модели для описания неупругого деформирования моно- и поликристаллов

Работы по созданию теорий, включающих в рассмотрение характеристики структуры материалов, позволяющих описывать неупругое деформирование поликристаллических металлов и сплавов, ведутся с начала XX века. Открытие дислокаций, движение которых является основным механизмом неупругого деформирования, а также других дефектов кристаллической решетки, стало мощным импульсом для развития теорий данного класса. Дальнейшие этапы совершенствования моделей неразрывно связаны с новыми экспериментальными данными, такими, как установление возможности расщепления дислокаций в кристаллах с низкой энергией дефекта упаковки (ЭДУ), взаимодействия полных и расщепленных дислокаций, взаимодействия дислокаций и примесных атомов, иных механизмов неупругого деформирования (двойникование, зернограничное скольжение и т.д.).

Под физическими теориями пластичности принято понимать модели, в структуру которых явным образом включено рассмотрение механизмов деформирования на различных масштабных уровнях, для чего вводятся соответствующие параметры, отражающие состояние внутренней микроструктуры материала, и эволюционные уравнения для них. Пионерскими в этом направлении работами принято считать модели Дж. И. Тейлора [135, 136, 137], Г.О. Закса [125, 134] и К.Ф. Элам.

Множество экспериментов подтверждает тот факт, что неупругое деформирование осуществляется путем скольжения преимущественно краевых дислокаций; винтовые дислокации имеют более высокую энергию активации и относительно низкую плотность. Скольжение происходит по вполне определенным кристаллографическим плоскостям, являющимися плоскостями плотной упаковки кристаллической решетки. Семейство параллельных плоскостей с нормалью $\mathbf{n}$ и направлением скольжения дислокаций в них, совпадающим с направлением вектора Бюргерса $\mathbf{b}$, в ФТП принято называть системами скольжения (СС). С точки зрения механики прохождение дислокаций по одной системе скольжения через весь образец порождает сдвиговую деформацию $\gamma\mathbf{m}$, где $\mathbf{m}$, следуя первым работам по ФТП, определяется соотношением (здесь и далее под $\mathbf{b}$понимается единичный вектор, совпадающий по направлению с соответствующим вектором Бюргерса):

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2}\ \mathbf{bn} + \mathbf{nb}\ , \tag{2.1}$$

и называется ориентационным тензором системы скольжения. При этом сдвиговая деформация определяется с точностью до скалярного коэффициента γ, имеющего смысл меры прошедших дислокаций по СС, которая называется сдвигом.

Условие активации СС, характеризующейся диадой $\mathbf{b}^k \mathbf{n}^k$, где k– номер системы скольжения, устанавливается критерием Шмида:

$$\mathbf{b}^k \mathbf{n}^k : \boldsymbol{\sigma} = \tau_c^k\ , \forall k\ , \tag{2.2}$$

где $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, τ_c^k – критические напряжения, при достижении которых соответствующая система скольжения активизируется и по ней реализуется сдвиг. Как и в макрофеноменологической теории пластического течения, в ФТП также можно построить поверхность текучести, разграничивающую упругое и пластическое деформирование материала. Действительно, каждое из уравнений (2.2) определяет гиперплоскость (грань) в пространстве напряжений. Пересекаясь, данные грани образуют ребра и вершины различного порядка (в зависимости от количества пересекающихся в ней граней). Совокупность уравнений (2.2) определяет многогранник (текучести) в пространстве напряжений. Положение изображающей точки в пространстве напряжений (ИТН) на грани поверхности текучести соответствует единственной активной системе скольжения, на ребре – двум, а в вершине – шести или восьми. Однако в отличие от макрофеноменологических моделей в ФТП данная поверхность вводится для каждого кристаллита и не используется явным образом при формулировке определяющего соотношения. Построение поверхности текучести для поликристаллического агрегата также возможно, однако в большинстве современных теорий не производится, поскольку в этом не возникает необходимости.

Скорость неупругих деформаций, реализуемых сдвигами по всем активным системам скольжения кристаллита, определяется суммой:

$$\mathbf{d}^{\mathrm{p}} = \sum_{k=1}^{K} \dot{\gamma}^{\,k}\, \mathbf{m}^{\,k}\,, \tag{2.3}$$

где K– количество активных систем скольжения, $\dot{\gamma}^{\,k}$ – скорость сдвига по k-й СС.

Стоит отметить, что в подавляющем большинстве существующих в настоящее время моделей в качестве ориентационных тензоров систем скольжения используется симметричная часть диады **bn** (2.1), что приводит к возникновению в численных расчетах сдвигов, не реализуемых в реальности. Допустим, например, что монокристалл с ГЦК решеткой ориентирован на одиночное скольжение, при котором активна система скольжения с вектором Бюргерса $\left[0\bar{1}1\right]$ и нормалью 111, тогда, следуя (2.1), $\mathbf{m} = 1/2\,\mathbf{bn} + 1/2\,\mathbf{nb}$, и кроме сдвиговой деформации $\gamma\mathbf{bn}$ возникнет деформация $\gamma\mathbf{nb}$, соответствующая сдвигу в направлении 111 по плоскости с нормалью $0\bar{1}1$, не реализуемому в экспериментах.

Эволюционные уравнения, характеризующие изменение критических касательных напряжений с течением процесса, являются важнейшей составляющей физических теорий пластичности. Вероятно, первым законом упрочнения было предложенное Тейлором [135] эволюционное соотношение, описывающее изотропное упрочнение, согласно которому скорость увеличения критических касательных напряжений во всех СС одинакова и пропорциональна суммарному накопленному сдвигу по всем СС. В более поздних работах стали различать деформационное (или активное) и латентное упрочнение; латентное упрочнение на некоторой СС определяется как изменение критического напряжения сдвига в ней при реализации сдвигов по другим системам, активное – упрочнение только за счет сдвига по данной системе скольжения. Стоит отметить, что экспериментальные работы свидетельствуют о существенном различии между латентным (скрытым) и активным упрочнением. В многочисленных экспериментах [79, 80] показано, что при одной и той же интенсивности скорости деформации при множественном скольжении (при значительном латентном упрочнении) скорость повышения критических касательных напряжений при одинаковой деформации выше, чем при одиночном скольжении.

Представленные выше характеристики относятся к отдельному кристаллиту с примерно правильным строением кристаллической решетки, имеющему некоторое количество краевых дислокаций. Однако для большинства конструкционных материалов требуется описывать отклик совокупности кристаллитов, образующей поликристаллический агрегат (ПКА). В связи с этим возникает вопрос передачи параметров нагружения (деформаций, напряжений) отдельным кристаллитам. Наиболее часто используемой гипотезой является гипотеза Фойгта, согласно которой полагается, что каждый кристаллит испытывает деформации, накладываемые на весь ПКА в целом, т.е. предполагается однородность деформированного состояния. Другой широко известной гипотезой является предположение Рейса об однородности напряженного состояния в пределах ПКА. Данные гипотезы дают соответственно верхнюю и нижнюю оценки интенсивности осредненных напряжений. В работе [123] используется более сложное нелинейное осреднение отклика ПКА с применением обеих гипотез с некоторым весовым коэффициентом, принимающим значение от 0 до 1, основанное на минимизации норм отклонения локальных характеристик от средних значений. Другая модель осреднения представлена в работе [116], где предполагается, что отклонения напряжений в каждом кристаллите от средних значений пропорционально соответствующему отклонению пластических деформаций с некоторым коэффициентом пропорциональности, являющимся материальной константой для рассматриваемого кристаллита. Также существует класс самосогласованных моделей [118], в которых напряженно–деформированное состояние отдельных кристаллитов (канонической формы) определяется их взаимодействием с окружающей изотропной упругопластической матрицей с осредненными характеристиками, однако такие модели не получили широкого распространения ввиду значительной сложности и ресурсоемкости их реализации.

2.1. Обзор основных физических теорий пластичности

В настоящее время существует множество математических моделей, включающих в рассмотрение скольжение дислокаций, отличающихся друг от друга определяющими соотношениями, способом определения скоростей сдвигов, учетом или неучетом упругих деформаций, способом описания упрочнения.

Исторически одними из первых моделей, основанных на ФТП, являются жесткопластические модели, не включающие в рассмотрение упругие деформации. Модель Закса [125, 134] была создана с целью оценки предела текучести σ_s поликристаллического агрегата при одноосном напряженном состоянии по известному значению критического касательного напряжения τ_c в системах скольжения, которое принималось равным для всех СС. Напряженное состояние каждого кристаллита считается одноосным (например, $\sigma_{11} \neq 0$ при равенстве нулю всех остальных компонент), но значения напряжений σ_{11}^n в каждом из них могут отличаться. При этом значение σ_{11}^n в n-м кристаллите определяется из условия активации хотя бы одной, наиболее благоприятно ориентированной системы скольжения. Для оценки предела текучести поликристаллического агрегата производится мысленное рассечение его плоскостью, перпендикулярной оси растяжения (сжатия), при этом площадь сечения каждого зерна равна s^n, а площадь всего сечения S, тогда:

$$\sigma_s = \frac{\sum \sigma_{11}^n s^n}{S}, \tag{2.4}$$

где сумма ведется по всем кристаллитам, попавшим в сечение. Стоит отметить, что без дополнительных предположений с помощью данной модели невозможно получить зависимость напряжения течения от деформации.

Одной из первых попыток построения более реалистичной модели была модель Тейлора [135, 136, 137], которая позволяет установить зависимость между напряжениями и деформациями ПКА. Основные гипотезы, принимаемые в данной модели:

- поведение каждого кристаллита описывается жесткопластической моделью;
- деформации реализуются только путем сдвигов по определенным системам скольжения;
- упрочнение принимается изотропным;
- деформации являются однородными по всему ПКА, т.е. применяется гипотеза Фойгта;
- границы не вносят вклада в упрочнение и деформации.

Большинство кристаллических материалов имеют избыточное количество систем скольжения для реализации произвольной деформации; действительно, тензор приращений (скорости) деформаций, являясь симметричным девиатором, имеет только 5 независимых компонент, тогда как, например, в ГЦК-кристаллах деформация сдвигом может реализоваться по 12 системам скольжения. В связи с этим основной проблемой в данной модели является определение приращений сдвигов на каждом шаге не более чем по пяти независимым системам скольжения. В модели Тейлора критерием отбора из активных систем скольжения актуальных является минимум суммарного сдвига по активным системам:

$$\sum_{k=1}^{K} \dot{\gamma}^{k} \to \min. \tag{2.5}$$

В случае использования неизотропного закона упрочнения критерием является минимум суммарной мощности диссипации энергии на реализующихся сдвигах:

$$\sum_{k=1}^{K} \tau_{c}^{k} \dot{\gamma}^{k} \to \min, \tag{2.6}$$

данный критерий был предложен позднее в работах Дж. Бишопа и Р. Хилла [92, 93]; при изотропном упрочнении частным случаем (2.6) является критерий (2.5).

К недостаткам данной модели можно отнести:

- необходимость решения оптимизационной задачи на каждом шаге интегрирования;
- не единственность выбора активных систем скольжения;
- неучет упругих деформаций;
- возможность возникновения ситуации, при которой изображающая точка напряжений находится не в вершине поверхности текучести, что соответствует количеству активных систем, меньшему пяти, в связи с чем возникает недоопределенность системы уравнений для установления пяти компонент девиатора напряжений.

Стоит отметить, что подавляющее большинство предположений в теории Тейлора принимаются в качестве постулатов и гипотез; математическое обоснование модели и доказательство ряда положений приведены в работах Бишопа и Хилла [92, 93, 111], при этом основные гипотезы и соотношения теории практически не отличались от модели Тейлора.

Класс упругопластических (УП) моделей был избавлен от существенного недостатка жесткопластических моделей, заключающийся в неучете упругих деформаций. Для каждого кристаллита (элемента мезоуровня) в данных теориях производится разделение скоростей полных деформаций на упругую и пластическую составляющую:

$$\mathbf{d} = \mathbf{d}^{e} + \mathbf{d}^{p}. \tag{2.7}$$

В качестве определяющего соотношения вводится анизотропный закон Гука в скоростной релаксационной форме:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{п} : \mathbf{d}^{e} = \mathbf{п} : \ \mathbf{d} - \mathbf{d}^{p} \ , \tag{2.8}$$

где **п**–тензор четвертого ранга упругих характеристик монокристалла. В случае больших градиентов перемещений в соотношении (2.8) вместо материальной производной тензора напряжений Коши используют независимую от выбора системы отсчета производную, чаще всего – коротационную.

Вероятно, пионерской работой в этом направлении была модель, разработанная Т.Г. Линем [37,122], полагавшим, что в случае малых деформаций нельзя пренебрегать упругой составляющей, которая сопоставима с полными и пластическим деформациями. При этом учет упругих деформаций снимает ограничение, связанное с несжимаемостью материала, которое имеет место в жесткопластических моделях. Перечень гипотез в основном совпадает с предположениями, принимаемыми в жесткопластических моделях, за исключением того, что гипотеза Фойгта применяется для полных скоростей деформаций:

$$\mathbf{d}^{n} = \mathbf{D}. \tag{2.9}$$

Учитывая, что пластические деформации определяются только скольжением краевых дислокаций по системам скольжения, имеем:

$$\mathbf{d}^{\mathrm{p}} = \sum_{k=1}^{K} \dot{\gamma}^{k} \mathbf{m}^{k}, \qquad \mathbf{d}^{\mathrm{e}} = \mathbf{d} - \mathbf{d}^{\mathrm{p}}. \tag{2.10}$$

Упрочнение принято изотропным и зависящим только от суммы сдвигов по всем системам скольжения кристаллита:

$$\begin{aligned} \tau_{\mathrm{c}}^{k} &= \mathrm{f}(\gamma_{\Sigma}), \\ \dot{\tau}_{\mathrm{c}}^{k} &= \dot{\mathrm{f}}(\gamma_{\Sigma}, \dot{\gamma}_{\Sigma}), \end{aligned} \tag{2.11}$$

где γ_{Σ} – суммарный сдвиг по всем СС рассматриваемого кристаллита за всё время нагружения.

Вычисление отклика кристаллита сводится к решению системы линейных (или квазилинейных, в зависимости от вида $\mathrm{f}(\gamma_{\Sigma})$) дифференциальных уравнений относительно сдвигов по системам скольжения $\dot{\gamma}^{k}(t)$:

$$\mathbf{m}^{i} : \mathbf{\Pi} : \left(\mathbf{d} - \sum_{k=1}^{K} \dot{\gamma}^{k} \mathbf{m}^{k} \right) = \mathrm{f}_{\gamma_{\Sigma}}(\gamma_{\Sigma})\, \dot{\gamma}_{\Sigma}, \ i = 1 \ldots K, \tag{2.12}$$

где K– общее количество СС, на которых выполняется условие течения в рассматриваемый момент, $\mathrm{f}_{\gamma_{\Sigma}}$ означает производную функции упрочнения по накопленному сдвигу. В случае применения численной схемы Эйлера решение системы

ОДУ (2.12) сводится к решению системы линейных (или нелинейных, в зависимости от вида $\mathrm{f}\ \gamma_{\Sigma}$) алгебраических уравнений относительно приращений сдвигов $\Delta\gamma_n^k$ на каждом шаге интегрирования [64]:

$$\mathbf{m}^i : \mathbf{\Pi} : \left(\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n - \sum_{k=1}^{K} \Delta\gamma_n^k \mathbf{m}^k \right) = \dot{\mathrm{f}}\ \gamma_{\Sigma\, n}\ \ \Delta\gamma_{\Sigma\, n},\ i = 1...K, \qquad (2.13)$$

где $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}_n$ – заданное приращение полных деформаций на шаге. Система уравнений (2.12) следует из условия нахождения изображающей точки напряжений (ИТН) на поверхности текучести.

Определение отклика поликристаллического агрегата, как и в моделях типа Тейлора-Бишопа-Хилла, производится с использованием той или иной процедуры осреднения напряжений в кристаллитах, содержащихся в ПКА, чаще всего – ориентационным осреднением.

Стоит отметить, что, как и в теории Тейлора-Бишопа-Хилла, в упругопластических моделях в качестве недостатка можно отметить проблему не единственности выбора набора из пяти активных систем скольжения из совокупности возможных систем (2.12). Для разрешения данной проблемы используются те же принципы, что и в жесткопластических моделях.

Класс упруговязкопластических (УВП) моделей лишен недостатка, связанного со сложностью определения набора активных систем скольжения, а также скоростей (или приращений) сдвига в каждый момент нагружения. Одной из первых в данном классе является модель [140], основанная на теории термоактивируемого движения дислокаций [117]. Общие положения упруговязкопластических моделей в основном совпадают с принятыми в модели Т.Г. Линя, за исключением соотношений для определения скоростей сдвигов в системах скольжения. Например, в цитируемой работе вязкопластическое соотношение, связывающее скорость сдвига с действующим касательным и критическим напряжениями, принято в виде:

$$\begin{aligned}&\dot{\gamma}^{j} = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\mathrm{H}_0/\kappa\theta\right) \sinh\left[\nu^*\left(\tau^{j} - \tau_{\mathrm{c}}^{j}\right)\right],\\ &\tau^{j} \ge \tau_{\mathrm{c}}^{j}, \ j = \overline{1,K},\end{aligned} \tag{2.14}$$

где $\dot{\gamma}_0$ – константа материала размерности [c^{-1}], H_0 – величина энергетического барьера Пайерлса, κ – константа Больцмана, θ – температура (K), ν^* – константа, характеризующая объем препятствий (т.н. активационный объем), τ^{j}, τ_{c}^{j} – действующее и критическое касательное напряжение в *j*-ой системе скольжения. Представленное соотношение имеет значительное количество параметров, в связи с чем его использование целесообразно лишь при рассмотрении неизотермических процессов; для описания изотермических процессов нагружения для определения скоростей сдвигов наиболее часто используются соотношения вида [84, 85, 88, 87, 114]:

$$\dot{\gamma}^{j} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{j}}{\tau_{\mathrm{c}}^{j}}\right)^{1/\mathrm{m}} \mathrm{H}\left(\tau^{j} - \tau_{\mathrm{c}}^{j}\right), \ j = \overline{1,K}, \tag{2.15}$$

где $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига в СС при достижении действующими касательными напряжениями критических, m– показатель скоростной чувствительности, $\mathrm{H}(\bullet)$ – функция Хэвисайда. В конкретных реализациях значение степенного параметра обычно принимает положительные значения, значительно меньшие 1, и идентифицируется из натурных экспериментов. Стоит отметить, что в последнее десятилетие вывод соотношения (2.15) часто производится на основе соотношения Орована:

$$\dot{\gamma}^{j} = \rho_{\mathrm{m}}^{j} \mathrm{b} \bar{\mathrm{v}}^{j}\left(\tau^{j}, \tau_{\mathrm{c}}^{j}, \theta\right), \tag{2.16}$$

где ρ_{m}^{j} – плотность подвижных дислокаций в *j*-ой системе скольжения, b– модуль вектора Бюргерса, $\bar{\mathrm{v}}^{j}$ – средняя скорость движения дислокаций в рассматриваемой СС, которая, в свою очередь, зависит от действующих и критических касательных напряжений, а также температуры.

Наряду с неоспоримым достоинством упруговязкопластических моделей в вопросе определения скоростей сдвигов, возникает проблема идентификации параметров $\dot{\gamma}_0$, m, которую необходимо проводить в экспериментах, обладающих значительной степенью сложности. В связи с этим в литературе существуют большие расхождения в определении значений параметров $\dot{\gamma}_0, \mathrm{m}$, которые варьируются в пределах $10^{-10} \div 10^{-2}$ c^{-1}и $10^{-3} \div 10^{-1}$соответственно, при этом в большинстве работ выбор значений из данных диапазонов не обоснован теоретически[82]. Некоторые вопросы теоретического обоснования выбора значений данных параметров рассмотрены в работах [101, 102] и отчасти связаны с обращением к исходному соотношению (2.14). В настоящее время с развитием вычислительной техники все большее применение получают методы численной оценки значений $\dot{\gamma}_0, \mathrm{m}$ на основе моделей более низкого масштабного уровня, таких как дислокационная [109] и атомарная (молекулярная) динамика.

Стоит отметить еще одну особенность УВП моделей, отличающую их от класса УП моделей, состоящую в том, что изображающая точка напряжений (ИТН) в ходе неупругого деформирования может выходить за пределы поверхности текучести, что следует из возможности превышения действующими касательными напряжениями τ^{j} текущих критических τ_c^{j} (2.15), в то время как в УП моделях это недопустимо. Однако при этом сохраняется свойство пороговости соотношения для пластических деформаций, вносимое функцией Хэвисайда в (2.15). Стоит отметить, что при стремлении значения степенного параметра $\mathrm{m} \to 0$ область, находящаяся за пределами поверхности текучести, в которой может находиться ИТН, сжимается к самой поверхности текучести. Данный факт показывает, что при уменьшении значений параметра m влияние вязкости на поведение материала, описываемое соотношением (2.15), становятся менее существенными, и в этом смысле УВП модель стремится к УП модели.

2.2. Теории упрочнения

В любой физической теорий пластичности одним из основных элементов, наряду с определяющими соотношениями, является описание упрочнения, т.е. изменения критических касательных напряжений при деформировании. Математическое описание упрочнения заключается в определении зависимостей критических касательных напряжений от набора параметров и переменных модели; данные зависимости в дальнейшем будем называть законом упрочнения. Стоит отметить, что закон упрочнения по своей сути отражает закономерности эволюции внутренней микроструктуры материала, и от уровня его проработки в значительной степени зависит качество моделирования процессов нагружения. Из многочисленных экспериментальных работ известно, что наличие упрочнения так или иначе связано с образованием различных препятствий на пути движения дислокаций, таких как барьеры, ступеньки, перегибы, сплетения дислокаций, образование субструктур и т.д. Классификация эффектов, вызывающих упрочнение, приведена в [59,146, 147].

Традиционным и одним из первых способов описания упрочнения является закон изотропного упрочнения (одинакового по всем СС), представленный в работах Дж. И. Тейлора [135, 136, 137]. Как отмечено выше, в данной модели полагалось, что скорости изменения критических напряжений в системах скольжения пропорциональны скорости изменения суммарного накопленного сдвига $\dot{\gamma}_\Sigma$ во всех СС:

$$\begin{aligned} &\dot{\tau}_c^{\,j} = f\left(\dot{\gamma}_\Sigma\right) = h\sum_{k=1}^{N}\dot{\gamma}^{\,k},\; j=\overline{1,N}, \\ &\tau_c^{\,j}\Big|_{t=0} = \tau_{c0}^{\,j},\; j=\overline{1,N}, \end{aligned} \tag{2.17}$$

где h – параметр упрочнения, $\dot{\gamma}^{\,k}$ – скорость сдвига в СС с номером k, N– количество всех СС в кристаллите, $\tau_{c0}^{\,j}$ – начальные критические напряжения. При этом в данном соотношении никак не отражены физические причины упрочнения, не учтен также факт преобладания латентного упрочнения над активным, подтвержденный многочисленными экспериментами. Другой способ записи изотропного закона упрочнения без явного указания переменных и параметров представлен в[146, 147].

Подход, основанный на введении матрицы упрочнения, представлен в работах [115,138, 139], в которых приведен анализ механизмов упрочнения и предложено следующее соотношение:

$$\dot{\tau}_c^{\,j} = \sum_{k=1}^{K} H_{jk} \dot{\gamma}^{\,k}, \qquad (2.18)$$

где H_{jk} – компоненты так называемой матрицы упрочнения, связывающей влияние сдвигов по СС с изменениями критических напряжений по всем системам, включая активные.

В целом схожий, но более общий подход предлагается в работе [103, 104], в которой структура самих компонент матрицы упрочнения H_{jk} не обсуждается, однако на основе детального анализа взаимодействий дислокаций в ГЦК – кристаллах выделяется 5 независимых компонент, ответственных за тот или иной механизм; для данных компонент предполагается идентификация в экспериментах. В более поздних работах наряду с экспериментальной рассматривается идентификация в численных экспериментах с применением моделей более низких масштабных уровней [97, 124,144].

Стоит отметить, что в большинстве работ по физическим теориям пластичности структура соотношений, описывающих упрочнение, практически не отличается или полностью совпадает с классическим соотношением (2.18), в котором претерпевают модификацию лишь коэффициенты упрочнения H_{jk}, которые могут представлять собой функции параметров состояния материала.

Одним из вариантов описания упрочнения в конститутивных моделях отличным от (2.18) способом является рассмотрение фундаментального соотношения для определения скоростей сдвигов (2.15) – уравнения Орована (2.16). В данном подходе [87] упрочнение связывают с уменьшением скорости движения мобильных дислокаций при образовании барьеров и иных препятствий, а также с изменением температуры.

Вариант с описанием кинематического упрочнения за счет введения соотношений для так называемых остаточных микронапряжений представлен в [90,117]; данный вариант основан на аналогии с макрофеноменологическими моделями, в которых упрочнение описывается эволюцией поверхности текучести (её формы и положения) в пространстве напряжений. В цитируемых работах поверхность текучести полагается сферой с непостоянным значением радиуса, тензор остаточных напряжений определяет положение центра поверхности текучести.

Экспериментальные работы по исследованию внутренней структуры материалов показывают, что в процессе нагружении материала при достижении существенных неупругих деформаций дислокации формируют субструктуры в виде скоплений хаотически ориентированных дислокаций, жгутов, стенок дислокаций, ячеистых структур и т.д. Очевидно, что такие структуры являются существенным препятствием для движения других дислокаций и интенсивность такого упрочнения будет тем выше, чем выше плотность дислокаций. В связи с этим значительная часть работ по ФТП [100, 104 – 107] посвящена рассмотрению скалярной плотности дислокаций в отдельных системах скольжения, для которой записываются эволюционные соотношения; при этом предполагается, что на плотность дислокаций оказывает влияние их движение, возникновение и аннигиляция. Стоит отметить, что общий вид закона упрочнения схож с классическим соотношением (2.18), однако коэффициенты упрочнения в нем выражаются явным образом через плотности дислокаций в системах скольжения.

Одним из перспективных направлений в построении моделей упрочнения является подход, основанный на гипотезе об аддитивности скоростей изменения критических касательных напряжений за счет различных механизмов. Так, в работах [65, 66] предлагается запись закона упрочнения в виде:

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \sum_{j=1}^{J} \mathrm{f}^{\,j} \quad \gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \alpha_p^{\,j} \quad, \; i,k = \overline{1,\mathrm{N}}, \qquad (2.19)$$

где $\mathrm{f}^{\,j}$ – функции, определяющие вклад в скорость упрочнения за счет того или иного механизма, J – количество учитываемых механизмов, $\alpha_p^{\,i}$ –наборы внутренних переменных, характеризующих соответствующие механизмы (вообще говоря, принимающие различные значения в каждый момент деформирования для разных систем скольжения), N – количество всех систем скольжения в рассматриваемом кристаллите. В рамках данного подхода предлагается разделение упрочнение на ориентированное и неориентированное. Первое предполагает упрочнение за счет накопления энергии поджатыми дислокациями вблизи различных барьеров. Ориентированное упрочнение разделяется по возможности высвобождения запасённой энергии. Например, высвобождение энергии может происходить при изменении действующего касательного напряжения в сторону уменьшения или смены направления. При этом уровень высвобождаемой энергии определяется сложностью предшествующего нагружения. Неориентированное упрочнение предполагает упрочнение независимо от направления движения дислокаций (образование перегибов, ступенек, кос, жгутов).

Преимуществом данного подхода является явное рассмотрение механизмов упрочнения и их раздельное описание с помощью различных соотношений, вносящих вклад в общее упрочнение. В цитируемых работах в качестве первого (основного) слагаемого предлагается использовать модификацию классического соотношения типа (2.18), описывающего взаимодействие собственными полями напряжений дислокаций рассматриваемой системы скольжения друг с другом и с лесовыми дислокациями; данное слагаемое относится к описанию неориентированного упрочнения. К дополнительным слагаемым относятся соотношения, описывающие ориентированное упрочнение за счет образования барьеров и аннигиляцию дислокаций при реверсивном скольжении дислокаций [65, 66]. Также в соотношение (2.19) могут быть добавлены слагаемые, ответственные за упрочнение за счет границ зерен [68] и образования двойниковых прослоек.

2.3. Проблема выделения квазитвердого движения на мезоуровне

Многочисленные эксперименты показывают, что развороты кристаллитов становятся существенными уже при достижении полной деформации образца порядка 3% [9, 52, 59], в связи с чем при теоретическом описании процессов интенсивных пластических деформаций (ИПД) необходим учет квазитвердого движения кристаллитов. Данная потребность приводит к необходимости построения геометрически нелинейных теорий, в которых существенным вопросом является выделение квазитвердого движения (вращательного как жесткого целого) из полного движения, определяемого кинематикой процесса. В настоящее время нет однозначного ответа на вопрос, какие причины приводят к разворотам зерен, в связи с чем в основе теоретического описания процессов разворотов лежит та или иная гипотеза о разложении полного движения, испытываемого кристаллитом в ходе нагружения, на квазитвердое (вращательное, поскольку трансляционное не привносит никаких изменений в соотношения для описания отклика материала)и собственно деформационное. Точность описания процессов квазитвердого вращения оказывает существенное влияние на физическую корректность определяющего соотношения и эволюционных уравнений для характеристик структуры материала при моделировании.

В большинстве работ, содержащих описание геометрически нелинейных моделей, кинематика сплошной среды определяется градиентом места **f** [39, 60, 63], связывающим в каждой точке среды бесконечно малые радиус-векторы материальных частиц из малой окрестности рассматриваемой точки в отсчетной K_0 и текущей K_t конфигурациях:

$$\mathbf{f} = \nabla \hat{\mathbf{r}}^{\mathrm{T}} = \hat{\mathbf{q}}_i \mathbf{q}^i, \quad \mathrm{d}\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{f} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r}, \tag{2.20}$$

где набла – оператор определен в отсчетной конфигурации, а радиус-вектор – в текущей; $\hat{\mathbf{q}}_i$ и $\mathbf{q}^i$ – векторы лагранжева базиса в актуальной и отсчетной конфигурациях, $\mathrm{d}\hat{\mathbf{r}}$, $\mathrm{d}\mathbf{r}$ – радиус-векторы некоторой материальной частицы из бесконечно малой окрестности выделенной точки среды в актуальной и отсчетной конфигурациях. Известно [29, 39, 63], что для любого невырожденного тензора существует однозначное полярное разложение:

$$\mathbf{f} = \boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{v} \cdot \boldsymbol{\rho}, \tag{2.21}$$

где **u**и **v** – симметричные положительно определенные тензоры, называемые соответственно правым и левым тензорами искажений, **ρ**– тензор ротации, сопровождающий деформации.

При рассмотрении как упругих, так и неупругих деформаций, вводится дополнительная разгруженная конфигурация K* [91, 117, 119, 120], которую связывает с отсчетной конфигурацией K_0 градиент неупругих искажений $\mathbf{f}^{\mathrm{in}}$:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{f}^{\mathrm{in}}, \tag{2.22}$$

где $\mathbf{f}^{\mathrm{e}}$ – градиент упругих искажений, с помощью которого промежуточная конфигурация K* преобразуется в текущую $\mathrm{K_t}$. Применяя данный подход к описанию деформирования кристаллических тел, учитывают, что неупругие искажения, реализуемые преимущественно скольжением краевых дислокаций, оставляют решетку инвариантной. При таком описании движения среды считается, что сначала материал деформируется чисто неупруго, оставляя решетку инвариантной, т.е. без поворотов и искажений, после чего решетка материала испытывает ротацию и упругие искажения, определяемые градиентом $\mathbf{f}^{\mathrm{e}}$. Таким образом, описание квазитвердого движения материала, если последнее имеет место, должно быть включено в упругую составляющую градиента места. Следуя разложению (2.21), для градиента упругих деформаций получим:

$$\mathbf{f}^{\mathrm{e}} = \boldsymbol{\rho}^{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{u}^{\mathrm{e}}, \tag{2.23}$$

в котором ортогональный тензор $\boldsymbol{\rho}^{\mathrm{e}}$ полагается ответственным за поворот решетки, а $\mathbf{u}^{\mathrm{e}}$ – за упругие искажения решетки. Стоит отметить, что ортогональный тензор $\boldsymbol{\rho}^{\mathrm{e}} = \hat{\mathbf{p}}_k \bar{\mathbf{p}}_k$ связывает тройки взаимно перпендикулярных собственных векторов $\bar{\mathbf{p}}_k$ и $\hat{\mathbf{p}}_k$ тензоров $\mathbf{u}^{\mathrm{e}}$ и $\mathbf{v}^{\mathrm{e}}$ соответственно [53], в силу чего он не связан с одними и теми же материальными волокнами (и с осями кристаллической решетки) на протяжении всего исследуемого процесса деформирования. Также стоит отметить, что промежуточная конфигурация K* определяется неоднозначно при разложении градиента места (2.22) на упругую и неупругую составляющие [95], что нетрудно показать:

$$\mathbf{f} = \mathbf{f}^{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{f}^{\mathrm{in}} = \mathbf{f}^{\mathrm{e}} \cdot \mathbf{o} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{f}^{\mathrm{in}} = \tilde{\mathbf{f}}^{\mathrm{e}} \cdot \tilde{\mathbf{f}}^{\mathrm{in}}, \tag{2.24}$$

где $\mathbf{o}$ – произвольный ортогональный тензор.

При постановке геометрически нелинейных задач в скоростях из разложения (2.22) получают:

$$
\begin{aligned}
\hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{T}} &\overset{об}{=} \mathbf{l} = \dot{\mathbf{f}}\cdot\mathbf{f}^{-1} = \left(\mathbf{f}^{\mathrm{e}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}}\right)^{\bullet}\cdot\left(\mathbf{f}^{\mathrm{e}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}}\right)^{-1} = \left(\dot{\mathbf{f}}^{\mathrm{e}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}} + \mathbf{f}^{\mathrm{e}}\cdot\dot{\mathbf{f}}^{\mathrm{in}}\right)\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}-1}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{e}-1} = \\
&= \dot{\mathbf{f}}^{\mathrm{e}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}-1}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{e}-1} + \mathbf{f}^{\mathrm{e}}\cdot\dot{\mathbf{f}}^{\mathrm{in}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}-1}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{e}-1} = \dot{\mathbf{f}}^{\mathrm{e}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{e}-1} + \mathbf{f}^{\mathrm{e}}\cdot\dot{\mathbf{f}}^{\mathrm{in}}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{in}-1}\cdot\mathbf{f}^{\mathrm{e}-1} = \\
&= \mathbf{l}^{\mathrm{e}} + \mathbf{l}^{\mathrm{in}},
\end{aligned}
\qquad (2.25)
$$

где $\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона, определенный в $К_t$. Далее, раскладывая градиент скорости перемещений на симметричную и антисимметричную составляющие, получаем:

$$
\mathbf{l} = \mathbf{l}^{\mathrm{e}} + \mathbf{l}^{\mathrm{in}} = \mathbf{w}^{\mathrm{e}} + \mathbf{d}^{\mathrm{e}} + \mathbf{w}^{\mathrm{in}} + \mathbf{d}^{\mathrm{in}} = \mathbf{w} + \mathbf{d}, \qquad (2.26)
$$

при этом симметричную составляющую $\mathbf{d}$ относят к собственно деформационному движению среды, антисимметричную $\mathbf{w}$ – к квазитвердому вращению. Тензор вихря $\mathbf{w}$характеризует мгновенную угловую скорость вращения материальных волокон, направленных вдоль собственных значений тензора $\mathbf{d}$. Стоит отметить, что разложение (2.26) является одним из вариантов записи широко известной в курсе МСС теоремы Коши-Гельмгольца о разложении произвольного движения среды на деформационное и вращательное [60]; следует заметить, что данное разложение является чисто геометрическим и не связано с эволюцией внутренней микроструктуры материала.

Один из первых способов описания разворотов кристаллитов в рамках физических теорий пластичности использовался в жесткопластической модели Дж. И. Тейлора, в которой спин $\boldsymbol{\omega}$ квазитвердого движения принимался равным антисимметричной части тензора скоростей неупругих сдвигов по системам скольжения кристаллита:

$$
\boldsymbol{\omega} = \sum_{k=1}^{\mathrm{K}} \dot{\gamma}^{k} \left(\mathbf{n}^{k}\mathbf{b}^{k} - \mathbf{b}^{k}\mathbf{n}^{k}\right), \qquad (2.27)
$$

где K– количество активных систем скольжения. Данная модель описывает поворот кристаллита, окруженного жесткими непроницаемыми границами, и называется «моделью полностью стесненного поворота Тейлора». С появлением упругопластических моделей логическим продолжением является модель, в которой спин квазитвердого вращения описывается разностью вихрей полных и пластических деформаций:

$$\boldsymbol{\omega} = \mathbf{w} - \mathbf{w}^{\text{in}} = \frac{1}{2}\left(\mathbf{l} - \mathbf{l}^{\text{T}}\right) - \sum_{k=1}^{K}\dot{\gamma}^{k}\left(\mathbf{b}^{k}\mathbf{n}^{k} - \mathbf{n}^{k}\mathbf{b}^{k}\right), \qquad (2.28)$$

при этом предполагается, что мгновенная угловая скорость вращения кристаллической решетки элемента мезоуровня соответствует упругому спину.

2.4. Общая структура двухуровневой конститутивной статистической упруговязкопластической модели

Остановимся на общей структуре двухуровневой конститутивной упруговязкопластической модели [74, 75]. Суть многоуровневого подхода заключается в том, что отклик на рассматриваемом масштабном уровне определяется по отклику определенной совокупности элементов нижестоящего уровня, достаточной для корректного отражения свойств на данном уровне [72]. Элементами каждого масштабного уровня являются соответствующие представительные объемы, с требуемой степенью адекватности отражающие свойства материала на рассматриваемом уровне; на каждом уровне используется модель материала первого порядка, в силу чего в пределах представительно объема рассматриваемого уровня напряженно-деформированное состояние полагается однородным. В рамках рассматриваемого двухуровневого подхода к моделированию неупругого поведения поликристаллических материалов элементом верхнего масштабного уровня является представительный макрообъем; представительным объемом макроуровня для поликристаллических материалов является конечный набор кристаллитов, называемый поликристаллическим агрегатом (ПКА). В свою очередь отдельный кристаллит является представительным объемом мезоуровня.

Перечислим основные гипотезы, принимаемые в двухуровневой конститутивной статистической упруговязкопластической модели:

- на макроуровне представительный объем (ПО) рассматриваемого материала состоит из конечного множества кристаллитов (элементов мезоуровня) с известным законом начального распределения ориентаций;
- представительным объемом мезоуровня является отдельный кристаллит, в начальный момент находящийся в естественной конфигурации с известной ориентацией и имеющий достаточное количество дислокаций для реализации сдвиговой деформации;
- нагружение полагается квазистатическим и является жестким – задается кинематика движения;
- градиент скорости перемещений частиц всех кристаллитов совпадает с градиентом скорости перемещений на макроуровне (расширенная гипотеза Фойгта);
- отклик каждого кристаллита определяется конститутивной моделью мезоуровня, описывающей основные механизмы неупругого деформирования;
- напряженное и деформированное состояние в пределах каждого кристаллита считается однородным (модель материала первого порядка [63]);
- квазитвердое вращение кристаллитов определяется принятой моделью ротации мезоуровня;
- отклик ПО макроуровня вычисляется осреднением откликов элементов мезоуровня с учетом условий согласования определяющих соотношений обоих уровней;
- квазитвердое движение на макроуровне описывается в соответствии с принимаемой гипотезой о разложении движения.

Более подробно остановимся на модели мезоуровня, описывающей поведение отдельного кристаллита. Полагается, что решетка в пределах каждого кристаллита имеет в каждый момент деформирования известную, практически одинаковую ориентацию и содержит достаточное для реализации предписанных неупругих деформаций количество дефектов. Неупругие деформации осуществляются преимущественно скольжением краевых дислокаций по вполне определенным кристаллографическим плоскостям. Как и в моделях типа Тейлора-Бишопа-

Хилла, совокупности параллельных плоскостей образуют системы скольжения (СС), которые описываются ориентационными тензорами **bn**, где **b** – единичный вектор в направлении вектора Бюргерса, **n** – единичная нормаль к плоскости скольжения. При наличии K активных СС в некотором кристаллите с номером n, неупругая составляющая меры скорости деформаций выражается соотношением:

$$\mathbf{z}^{\mathrm{in}\;n} = \sum_{k=1}^{\mathrm{K}} \dot{\gamma}^{n\;k}\,\mathbf{b}^{n\;k}\,\mathbf{n}^{n\;k}, \qquad (2.29)$$

где $\dot{\gamma}^{n\;k}$ – скорость скольжения по СС с номером *k* в *n*-м кристаллите. Далее индекс кристаллита будет опущен. Скорость сдвига в системе скольжения определяется вязкопластическим соотношением:

$$\dot{\gamma}^{j} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{\tau^{j}}{\tau_{\mathrm{c}}^{j}} \right)^{1/\mathrm{m}} \mathrm{H}\left(\tau^{j} - \tau_{\mathrm{c}}^{j} \right), \quad j = \overline{1,\mathrm{K}}, \qquad (2.30)$$

где τ^{j}, τ_{c}^{j} – действующие и критические касательные напряжения в СС с номером *j*, $\dot{\gamma}_0$ – скорость сдвига в СС при достижении действующим касательным напряжением значения критического напряжения, m – параметр скоростной чувствительности материала. Стоит отметить, что по отношению к количеству реальных СС в кристаллите число систем скольжения удвоено(системы с одной нормалью и противоположными векторами Бюргерса считаются различными), в этом случае в каждой из активных систем скорости сдвигов и касательные напряжения могут быть только положительными.

Для критических касательных напряжений на системе скольжения с номером *k* принимается эволюционное соотношение в общем виде (2.19):

$$\dot{\tau}_c^{(k)} = \sum_{j=1}^{\mathrm{J}} \mathrm{f}_j^{(k)}\left(\gamma^{(i)}, \dot{\gamma}^{(i)}; \alpha_{\,p}^{\,j} \right), \quad i,k = \overline{1,\mathrm{N}}, \qquad (2.31)$$

в котором каждое слагаемое ответственно за тот или иной механизм упрочнения. В настоящей работе закон упрочнения содержит только одно слагаемое, ответственное за упрочнение за счет взаимодействия полями собственных напряжений активных дислокаций с ранее накопленными, и не учитывает, например, упрочнение за счет образования различных барьеров при взаимодействии расщепленных дислокаций, упрочнение на границах зерен, которые являются мощным препятствием на пути движения дислокации, а также упрочнение за счет возникновения двойниковых прослоек внутри зерен, являющихся, по сути, новыми границами зерен. Указанное упрощение сделано в силу специфики работы, ориентированной на анализ качественных эффектов, возникающих при сложном нагружении, чтобы не отягчать изложение обилием параметров, возникающих при введении дополнительных механизмов упрочнения. При этом, как показано в разделе 4.2, используемый закон упрочнения позволяет с удовлетворительной степенью точности решить задачу идентификации с последующей верификацией модели, демонстрирующей приемлемую адекватность.

Скорости изменения критических напряжений на каждой СС полагаются равными сумме скоростей изменения сопротивления сдвигу по различным механизмам. В качестве основного закона упрочнения в работах, цитируемых в разделе 4.2, использовалось соотношение вида:

$$
\begin{aligned}
&\dot{\tau}_c^{(k)}\left(\gamma^{(i)},\dot{\gamma}^{(i)}\right)=\mathrm{G}\left(\sum_{i=1}^{24}\mathrm{a}_i^{(k)}\frac{\left(\gamma^{(i)}\right)^{\psi}\dot{\gamma}^{(i)}}{\left(\sum_{i=1}^{24}\gamma^{(i)}\right)^{\delta}}\right), k=\overline{1,24},\quad \psi>0,\ \gamma^{(i)}\geq 0,\\
&\mathrm{a}_i^{(i)}=\xi_0,\quad \mathrm{a}_k^{(i)}=\xi_0\beta,\ i\neq k,\\
&\tau_c^{(k)}(0)=\tau_{c0}^{(k)},
\end{aligned}
\qquad (2.32)
$$

где $\mathrm{a}_i^{(k)}$ – матрица безразмерных коэффициентов, причем ее диагональные члены описывают деформационное (активное) упрочнение, а недиагональные – латентное; ξ_0 – параметр, равный отношению модуля деформационного упрочнения к модулю сдвига, параметр β равен отношению коэффициентов латентного и деформационного упрочнения; G – модуль сдвига. Соотношение (2.32) описывает изменение критических напряжений в СС независимо от направления деформирования (за счет образования пересечений дислокаций, жгутов, кос) при взаимодействии движущихся в данной СС дислокаций с дислокациями, накопленными в других СС. Показатель степени ψ позволяет учесть нелинейность процесса упрочнения. В отличии от известных законов упрочнения, в соотношение (2.32)в знаменатель внесен суммарный сдвиг по всем СС кристаллита, что позволяет учесть уменьшение плотности мобильных дислокаций с ростом суммарной плотности дислокаций во всех СС и описать известный экспериментальный факт насыщения напряжения течения при циклических нагружениях; при этом степенной показатель δ позволяет учесть меру влияния предшествующей истории деформирования на текущие изменения дефектной структуры материала. Все приведенные выше параметры определяются в процедуре идентификации по экспериментальным данным для каждого материала, что, в свою очередь, выгодно отличает модели ФТП от макрофеноменологических, в которых параметры идентифицируются для конкретного вида нагружения и конкретного материала. В предлагаемой работе параметры модели были идентифицированы для материала Ст45 по имеющимся данным экспериментальных исследований [16], процедура и результаты решения задачи идентификации подробно рассмотрены в разделе 4.2.

Для описания кинематики движения введем следующие системы координат (СК): неподвижную лабораторную систему (ЛСК) с ортонормированным базисом $\mathbf{e}_k$; подвижную систему координат ПСК$_{\text{К}}$, связанную с кристаллографическим направлением и плоскостью, с базисом $\tilde{\mathbf{e}}_k$; подвижную систему координат ПСК$_{\text{П}}$, отвечающую за квазитвердое движение представительного макрообъема (поликристаллического агрегата), с базисом $\overline{\mathbf{e}}_k$. Также для описания необходимо определить операторы Гамильтона в данных СК; в ЛСК:

$$\nabla = \mathbf{e}_k \frac{\partial}{\partial x_k}, \tag{2.33}$$

и в подвижных системах координат, ПСК$_{\text{П}}$ и ПСК$_{\text{К}}$, соответственно:

$$\overline{\nabla} = \overline{\mathbf{e}}_k \frac{\partial}{\partial \hat{x}_k}; \quad \tilde{\nabla} = \tilde{\mathbf{e}}_k \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_k}. \tag{2.34}$$

Для набла-оператора известно свойство инвариантности относительно выбора системы координат:

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{x}_i}\tilde{\mathbf{e}}_i = \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial x_k}{\partial \tilde{x}_i}\mathrm{o}_{in}\mathbf{e}_n = \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial \mathrm{o}_{mk}\tilde{x}_m}{\partial \tilde{x}_i}\mathrm{o}_{in}\mathbf{e}_n =$$
$$= \frac{\partial}{\partial x_k}\mathrm{o}_{mk}\frac{\partial \tilde{x}_m}{\partial \tilde{x}_i}\mathrm{o}_{in}\mathbf{e}_n = \mathrm{o}_{ik}\mathrm{o}_{in}\frac{\partial}{\partial x_k}\mathbf{e}_n = \frac{\partial}{\partial x_k}\mathbf{e}_k, \qquad (2.35)$$

при этом стоит отметить, что данное соотношение получено только для СК, связанных аффинными преобразованиями, в связи с чем оно применимо только для материалов первого порядка.

Отметим, что для обозначения «родственных» переменных макроуровня используются прописные символы, на мезоуровне – аналогичные строчные. Определим связи базисных векторов $ПСК_К$ и $ПСК_П$ с векторами базиса ЛСК:

$$\mathbf{o} = \mathbf{e}_i\tilde{\mathbf{e}}_i,\ \tilde{\mathbf{e}}_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{o} = \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i,\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i\tilde{\mathbf{e}}_i,\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o},$$
$$\mathbf{O} = \mathbf{e}_i\bar{\mathbf{e}}_i,\ \bar{\mathbf{e}}_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{O} = \mathbf{O}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i,\ \boldsymbol{\Omega} = \dot{\bar{\mathbf{e}}}_i\bar{\mathbf{e}}_i,\ \boldsymbol{\Omega} = \dot{\mathbf{O}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{O}. \qquad (2.36)$$

Отметим, что компоненты любого ортогонального тензора в системах координат, которые он связывает, тождественно равны, например:

$$\mathbf{o} = \mathrm{o}_{ij}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = \tilde{\mathrm{o}}_{ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = \mathbf{e}_i\tilde{\mathbf{e}}_i,$$
$$\mathrm{o}_{nm} = \mathbf{e}_n \cdot \ \mathbf{e}_i\tilde{\mathbf{e}}_i \ \cdot \mathbf{e}_m = \tilde{\mathbf{e}}_n \cdot \mathbf{e}_m,$$
$$\tilde{\mathrm{o}}_{nm} = \tilde{\mathbf{e}}_n \cdot \ \mathbf{e}_i\tilde{\mathbf{e}}_i \ \cdot \tilde{\mathbf{e}}_m = \tilde{\mathbf{e}}_n \cdot \mathbf{e}_m,$$
$$\mathrm{o}_{nm} = \tilde{\mathrm{o}}_{nm} = \tilde{\mathbf{e}}_n \cdot \mathbf{e}_m. \qquad (2.37)$$

В скоростях кинематика движения на мезоуровне будет определяться градиентом полных скоростей перемещений:

$$\mathbf{l} = \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{T}}, \qquad (2.38)$$

а связь кинематических характеристик макро- и мезоуровней– расширенной гипотезой Фойгта:

$$\hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{T}} = \hat{\nabla}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}. \qquad (2.39)$$

Отдельно остановимся на вопросе о выборе меры скорости деформированного состояния. Зачастую при построении математических моделей неупругого деформирования поликристаллов мера скорости деформации, тензор напряжений и тензор деформации принимаются симметричными, однако существует ряд аргументов против их использования в пользу несимметричных мер [73]. К ним относится искусственное введение сдвигов по несуществующим системам скольжения при применении симметричных ориентационных тензоров (2.1). Физический смысл неголономной меры деформированного состояния, получаемой коротационным интегрированием $\mathbf{d} = 1/2\left(\hat{\nabla}\mathbf{v} + \mathbf{v}\hat{\nabla}\right)$, не ясен и в работах, как правило, вообще не обсуждается. Симметрия тензора упругих свойств внутри пар индексов обусловлена тем, что при определении его компонент в натурных экспериментах предполагается априорная симметрия мер напряженного и деформированного состояний. Стоит отметить, что для кристаллов высшей кубической симметрии несимметричность тензора упругих свойств **п** внутри пар индексов вызывает определенные сомнения, однако несимметричность **п** для кристаллов с более низкой степенью симметрии может быть весьма вероятной. Между тем в численном эксперименте было показано, что незначительное отклонение значений компонент (порядка 0.5%) внутри пары индексов тензора **п** приводит к существенным отличиям в отклике кристаллита при одинаковом нагружении[68].

В качестве несимметричной меры скорости деформированного состояния используется транспонированный градиент относительной скорости перемещений [73].Ниже представлены соотношения для получения связи меры скорости изменения деформированного состояния на мезоуровне с градиентом полных скоростей перемещений. Для получения связи с градиентом полных скоростей перемещений введем радиус-векторы $\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{r}}$ произвольно выбранной материальной точки в ЛСК и $ПСК_К$ соответственно. Отметим, что поступательная составляющая переносного движения $ПСК_К$ относительно лабораторной не вносит вклад в градиенты величин («приписанных» к материальным частицам) в этой системе координат, что позволяет без потери общности принять, что начала координат данных систем совмещены на протяжении всего процесса. В этом случае $\mathbf{r}$ и $\tilde{\mathbf{r}}$ являются радиус-векторами одной материальной точки, но определенными в различных системах координат, отличающихся только на жесткий поворот $\mathbf{o} = \mathbf{e}_k \tilde{\mathbf{e}}_k$ (рис. 2.1), при этом мгновенная скорость вращения $ПСК_К$ относительно ЛСК описывается тензором спина $\boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o}$, определяемым из модели ротации кристаллита, которая будет рассмотрена в разделе 3.2.Связь компонент $\mathbf{r}$ и $\tilde{\mathbf{r}}$ в базисах лабораторной и подвижной системе координат с учетом (2.36) и (2.37)примет вид:

$$\tilde{\mathbf{r}} = \tilde{x}_i \tilde{\mathbf{e}}_i = \mathbf{r} = x_j \mathbf{e}_j = x_j \mathrm{o}_{ik} \tilde{\mathbf{e}}_i \tilde{\mathbf{e}}_k \cdot \tilde{\mathbf{e}}_j = x_j \mathrm{o}_{ij} \tilde{\mathbf{e}}_i \Rightarrow \tilde{x}_i = \mathrm{o}_{ij} x_j, \qquad (2.40)$$

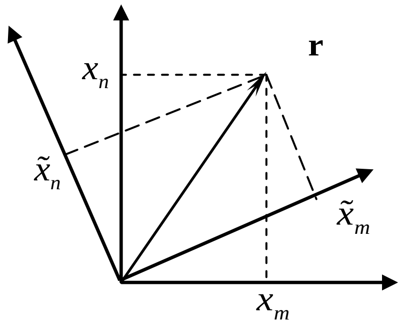

Рис. 2.1. Иллюстрация связи компонент радиус-вектора в различных системах координат

Напомним, что тильдой сверху обозначаются величины, определенные в ПСК$_{\text{К}}$. Переносная скорость $\mathbf{v}_e$ движения произвольной материальной частицы определяется как скорость точки $\tilde{\mathbf{r}}$, жестко связанной с ПСК$_{\text{К}}$[61, 62]; учитывая (2.36), получим:

$$\mathbf{v}_e = \frac{d}{dt} \ \tilde{x}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \ \big|_{\tilde{x}_i = \mathrm{const}} = \tilde{x}_i \dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i = \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{x}_i \tilde{\mathbf{e}}_i = \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{r}}, \qquad (2.41)$$

Тогда, следуя [62], относительная скорость движения точки среды (т.е. с позиций наблюдателя в ПСК$_{\text{К}}$):

$$\mathbf{v}_{\mathrm{r}} = \mathbf{v} - \mathbf{v}_e = \mathbf{v} - \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{r}}. \qquad (2.42)$$

Учитывая (2.42) и независимость спина ПСК$_{\text{К}}$ от координат, градиент относительной скорости перемещений примет вид:

$$\hat{\nabla} \mathbf{v}_{\mathrm{r}}^{\mathrm{T}} = \left[\hat{\nabla} \ \mathbf{v} - \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{r}} \ \right]^{\mathrm{T}} = \hat{\nabla} \mathbf{v}^{\mathrm{T}} - \left[\hat{\nabla} \ \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{r}} \ \right]^{\mathrm{T}} = \nabla \mathbf{v}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\omega}, \qquad (2.43)$$

$$\left[\hat{\nabla} \ \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{r}} \ \right]^{\mathrm{T}} = \ \hat{\nabla} \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{r}} \ ^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\omega} \cdot \hat{\nabla} \tilde{\mathbf{r}}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\omega}, \qquad (2.44)$$

где использовано тождество:

$$\nabla (\mathbf{T} \cdot \mathbf{a}) \ ^{\mathrm{T}} = \frac{\partial}{\partial x^i} (\mathrm{T}_{jk} \mathrm{a}^k) \, \mathbf{e}^j \mathbf{e}^i = \left(\frac{\partial \mathrm{T}_{jk}}{\partial x^i} \mathrm{a}^k + \mathrm{T}_{jk} \frac{\partial \mathrm{a}^k}{\partial x^i} \right) \mathbf{e}^j \mathbf{e}^i = \ \nabla \mathbf{T} \cdot \mathbf{a} \ ^{\mathrm{T}} + \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{a}^{\mathrm{T}}.$$

В качестве меры скорости деформаций выступает градиент относительных скоростей перемещений [73]:

$$\mathbf{z} \overset{об}{=} \hat{\nabla}\mathbf{v}_{\text{r}}^{\text{T}} = \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\text{T}} - \boldsymbol{\omega}, \tag{2.45}$$

являющийся несимметричным индифферентным тензором.

Покажем индифферентность меры $\mathbf{z}$. Пусть на кристаллит наложено жесткое движение, описываемое ортогональным тензором $\mathbf{O}_{\text{rig}} = \tilde{\mathbf{e}}_i \tilde{\mathbf{e}}'_i$, где тройка векторов $\tilde{\mathbf{e}}'_i$ представляет собой базис ПСК$_{\text{К}}$ после наложения жесткого движения (базис ПСК$_{\text{К}}$□). Тензор спина, соответствующий движению базиса $\tilde{\mathbf{e}}'_i$ относительно $\tilde{\mathbf{e}}_i$, принимает вид $\boldsymbol{\Omega}_{\text{rig}} = \dot{\tilde{\mathbf{e}}}'_i \tilde{\mathbf{e}}'_i = \dot{\mathbf{O}}_{\text{rig}}^{\text{T}} \cdot \mathbf{O}_{\text{rig}}$. Отметим, что системы координат $\tilde{\mathbf{e}}_i$ и $\tilde{\mathbf{e}}'_i$, движущиеся друг относительно друга, являются абсолютно равноправными, в силу чего вид соотношения в СК с базисом $\tilde{\mathbf{e}}'_i$ будет аналогичным (2.45):

$$\hat{\nabla}'\mathbf{v}'_{\text{r}} = \hat{\nabla}'\mathbf{v}' + \boldsymbol{\omega}', \tag{2.46}$$

где штрихи указывают на то, что величины определены с позиций подвижного наблюдателя в системе координат $\tilde{\mathbf{e}}'_i$. Стоит отметить, что доказательство индифферентности производится для величины $\mathbf{z}^{\text{T}}$, что не уменьшает общности и позволяет упростить выкладки; в связи с этим спин в соотношении (2.46) имеет знак, обратный знаку в (2.45).Спин $\boldsymbol{\omega}'$ описывает квазитвердое движения ПСК$_{\text{К}}$□ (при наложенном движении) относительно ЛСК:

$$\dot{\tilde{\mathbf{e}}}'_i = \boldsymbol{\omega}' \cdot \tilde{\mathbf{e}}'_i. \tag{2.47}$$

Принимая во внимание (2.36) и неподвижность базиса ЛСК, из вышесказанного следует:

$$
\begin{aligned}
&\tilde{\mathbf{e}}_i' = \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i = \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i, \\
&\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i' = \dot{\mathbf{O}}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i = \\
&\quad = \dot{\mathbf{O}}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i, \\
&\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i' = \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i, \\
&\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i' = \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i' + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i, \\
&\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i' = \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i' + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i' = \left(\boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}\right) \cdot \tilde{\mathbf{e}}_i',
\end{aligned}
\tag{2.48}
$$

Сопоставляя с (2.47), получим:

$$
\boldsymbol{\omega}' = \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}. \tag{2.49}
$$

В работах [63, 53] показано:

$$
\hat{\nabla}' \mathbf{v}' = \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\nabla} \mathbf{v} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}} - \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}}. \tag{2.50}
$$

Подставляя (2.49) и (2.50) в (2.46), получаем:

$$
\begin{aligned}
&\hat{\nabla}' \mathbf{v}_{\mathrm{r}}' = \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\nabla} \mathbf{v} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}} - \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} + \boldsymbol{\Omega}_{\mathrm{rig}} + \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}} = \\
&\mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \left(\hat{\nabla} \mathbf{v} + \boldsymbol{\omega}\right) \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}} = \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\nabla} \mathbf{v}_{\mathrm{r}} \cdot \mathbf{O}_{\mathrm{rig}}.
\end{aligned}
\tag{2.51}
$$

Таким образом, показано, что градиент относительных скоростей перемещений является несимметричной и индифферентной мерой скорости изменения деформированного состояния. При этом несимметричность позволяет учитывать полную кинематику движения (симметричные меры определены с точностью до произвольного антисимметричного тензора). Также стоит обратить внимание, что данная мера учитывает движение только относительно подвижной системы координат, связанной с материалом ($\text{ПСК}_{\text{К}}$), т.е. собственно деформационное движение материала, что выгодно отличает её от других мер скорости деформаций, физический смысл которых определяется исключительно с позиций кинематики без привязки с материальным осям.

Для введенной меры скорости деформаций вводится аддитивное разложение на упругую и неупругую составляющие:

$$
\mathbf{z} = \mathbf{z}^{\mathrm{e}} + \mathbf{z}^{\mathrm{in}}. \tag{2.52}
$$

В качестве определяющего соотношения на мезоуровне принят анизотропный закон Гука в скоростной релаксационной форме:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{п} : \ \mathbf{z} - \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \ , \qquad (2.53)$$

где $\bullet^{\mathrm{cr}}$ обозначена коротационная производная, являющаяся индифферентной, $\boldsymbol{\omega}$ – спин квазитвердого вращения кристаллита, определяемый моделью ротации, $\mathbf{П}$ – тензор четвертого ранга упругих свойств кристаллита.

Для получения отклика поликристаллического агрегата, состоящего из множества кристаллитов, используется определяющее соотношение, аналогичное соотношению (2.53), записанное для характеристик макроуровня:

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{CR}} = \dot{\boldsymbol{\Sigma}} + \boldsymbol{\Sigma}\cdot\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{П} : \ \mathbf{Z} - \mathbf{Z}^{\mathrm{in}} \ , \qquad (2.54)$$

где $\boldsymbol{\Sigma}$ – тензор напряжений Коши макроуровня, $\boldsymbol{\Omega}$ – тензор спина, описывающий квазитвердое движение всего ПКА в целом, $\mathbf{П}$ – тензор четвертого ранга упругих свойств, $\mathbf{Z}$ и $\mathbf{Z}^{\mathrm{in}}$ –мера полной и неупругой составляющей скорости деформации. Физический смыл компонент Σ_{ij} тензора Коши на макроуровне в ортонормированной СК, также как и на мезоуровне, определяется величиной проекции вектора напряжений, действующего на площадку с нормалью $\bar{\mathbf{e}}_i$, на направление вектора $\bar{\mathbf{e}}_j$.Ввиду того, что в настоящее время отсутствуют натурные эксперименты, использующие для обработки результатов несимметричные меры напряженно-деформированного состояния, нет возможности обнаружить несимметричность тензора напряжений, равно как и наличие моментных напряжений при нагружении. В связи с этим тензор упругих свойств принимается симметричным внутри пар индексов. На макроуровне в качестве меры полных скоростей деформаций принят градиент относительных скоростей перемещений:

$$\mathbf{Z} \overset{об}{=} \bar{\nabla}\mathbf{V}_{\mathrm{r}}^{\mathrm{T}} = \nabla\mathbf{V}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{\Omega}, \qquad (2.55)$$

где $\nabla\mathbf{V}^{\mathrm{T}}$ – определяет кинематику нагружения на макроуровне в базисе неподвижной ЛСК. Нетрудно показать, что данная мера является несимметричной и индифферентной к наложенному жесткому движению.

В рамках используемого конститутивного подхода [74, 75] величины $\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{\Pi}$, $\mathbf{Z}^{\mathrm{in}}$, $\mathbf{\Sigma}$ являются внутренними явными переменными макроуровня, для которых записываются замыкающие соотношения (в общем виде) [75]:

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}\left(\boldsymbol{\omega}^{i}, \mathbf{o}^{i}\right),\\
&\mathbf{\Pi} = \mathbf{\Pi}\left(\boldsymbol{\pi}^{i}, \mathbf{o}^{i}\right),\\
&\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \mathbf{Z}^{\mathrm{in}}\left(\mathbf{z}^{\mathrm{in}\,i}, \mathbf{o}^{i}\right),\\
&\mathbf{\Sigma} = \mathbf{\Sigma}\left(\boldsymbol{\sigma}^{i}, \mathbf{o}^{i}\right),
\end{aligned}
\tag{2.56}
$$

где верхним индексом iобозначен номер элемента мезоуровня. При этом величины макроуровня (2.56)зависят от всей совокупности параметров мезоуровня, указанных справа. Для определения конкретного вида данных соотношений используются условия согласования определяющих соотношений мезо- и макроуровней. Идея согласования определяющих соотношений заключается в получении условий, при которых ОС на обоих уровнях имеют идентичный вид, при принятии ряда априорных гипотез о связях характеристик; в настоящей работе в качестве таковых приняты следующие:

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle,\\
&\mathbf{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle,\\
&\mathbf{\Pi} = \langle \boldsymbol{\pi} \rangle,
\end{aligned}
\tag{2.57}
$$

где первое условие устанавливает связь мгновенной угловой скорости вращения ПСК$_{\Pi}$ со средним значением спина элементов мезоуровня, что позволяет применять произвольную модель ротации на нижнем масштабном уровне. Отметим, что тензор $\mathbf{\Omega}$, определяемый $(2.57)_1$, является антисимметричным при условии антисимметричности $\boldsymbol{\omega}$, что выгодно отличает данный способ от иных возможных вариантов [75]. Второе условие $(2.57)_2$ связывает напряженное состояние макро- и мезоуровней. Третье условие устанавливает связь между упругими характеристиками двух масштабных уровней. Для установления замыкающих уравнений используется расширенная гипотеза Фойгта, связывающая кинематическое воздействие мезо- и макроуровней:

$$\nabla\mathbf{v} = \nabla\mathbf{V}, \tag{2.58}$$

где набла-операторы определены в ЛСК (для скоростей используется текущий лагранжев подход, в котором в каждый момент деформирования лагранжева система отождествляется с ЛСК). Из соотношений $(2.57)_1$ и (2.58) нетрудно получить связь мер скоростей деформаций на различных масштабных уровнях в виде:

$$\mathbf{Z} = \langle\mathbf{z}\rangle. \tag{2.59}$$

Получим условия согласования определяющих соотношений масштабных уровней, исходя из(2.57), (2.54) и (2.53). Для этого представим величины, относящиеся к каждому элементу мезоуровня и входящие в определяющие соотношение, как суммы средних значений (по всему ПКА) и отклонений от них:

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\pi} = \langle\boldsymbol{\pi}\rangle + \boldsymbol{\pi}', \;\; \boldsymbol{\sigma} = \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle + \boldsymbol{\sigma}', \\ \mathbf{z} = \langle\mathbf{z}\rangle + \mathbf{z}', \;\; \mathbf{z}^{\mathrm{in}} = \langle\mathbf{z}^{\mathrm{in}}\rangle + \mathbf{z}^{\mathrm{in}\prime}, \\ \boldsymbol{\omega} = \langle\boldsymbol{\omega}\rangle + \boldsymbol{\omega}', \end{gathered} \tag{2.60}$$

где $\langle\bullet\rangle$ – оператор осреднения. Данный оператор должен обладать следующими свойствами:

$$\langle\mathbf{a}'\rangle = 0, \;\; \langle\mathbf{a}+\mathbf{b}\rangle = \langle\mathbf{a}\rangle + \langle\mathbf{b}\rangle, \;\; \langle\beta\mathbf{a}\rangle = \beta\langle\mathbf{a}\rangle, \tag{2.61}$$

где $\mathbf{a}$ – некоторая случайная тензорная величина произвольного ранга, β – постоянная величина. Подставляя (2.60) в (2.53), получим:

$$\begin{gathered} \langle\dot{\boldsymbol{\sigma}}\rangle + \dot{\boldsymbol{\sigma}}' \; + \; \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle + \boldsymbol{\sigma}' \; \cdot \; \langle\boldsymbol{\omega}\rangle + \boldsymbol{\omega}' \; - \; \langle\boldsymbol{\omega}\rangle + \boldsymbol{\omega}' \; \cdot \; \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle + \boldsymbol{\sigma}' \; = \\ = \; \langle\boldsymbol{\pi}\rangle + \boldsymbol{\pi}' \; : \; \langle\mathbf{z}\rangle + \mathbf{z}' - \langle\mathbf{z}^{\mathrm{in}}\rangle - \mathbf{z}^{\mathrm{in}\prime} \; . \end{gathered} \tag{2.62}$$

Усреднение по всем элементам мезоуровня приводит к соотношению:

$$\begin{gathered} \langle\dot{\boldsymbol{\sigma}}\rangle + \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\cdot\langle\boldsymbol{\omega}\rangle - \langle\boldsymbol{\omega}\rangle\cdot\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle + \langle\boldsymbol{\sigma}'\cdot\boldsymbol{\omega}'\rangle - \langle\boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}'\rangle = \\ = \langle\boldsymbol{\pi}\rangle : \; \langle\mathbf{z}\rangle - \langle\mathbf{z}^{\mathrm{in}}\rangle \; + \Big\langle \boldsymbol{\pi}' : \; \mathbf{z}' - \mathbf{z}^{\mathrm{in}\prime} \; \Big\rangle. \end{gathered} \tag{2.63}$$

Используя априори накладываемую связь характеристик макро и мезоуровней (2.57), соотношение (2.63) преобразуется к виду:

$$
\begin{aligned}
&\dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Sigma}\cdot\mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{\Sigma} + \left\langle \boldsymbol{\sigma}'\cdot\boldsymbol{\omega}' \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}' \right\rangle = \\
&= \mathbf{\Pi} : \;\; \mathbf{Z} - \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \right\rangle \;\; + \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \;\; \mathbf{z}' - \mathbf{z}^{\mathrm{in}\prime} \;\; \right\rangle = \\
&= \mathbf{\Pi} : \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \mathbf{z}^{\mathrm{e}\prime} \right\rangle .
\end{aligned}
\tag{2.64}
$$

При выполнении условий согласования возникает вопрос отнесения величины

$$
\delta\mathbf{Z} = \mathbf{\Pi}^{-1} : \;\; \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \mathbf{z}^{\mathrm{e}\prime} \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}'\cdot\boldsymbol{\omega}' \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}' \right\rangle
\tag{2.65}
$$

к одной из характеристик макроуровня. При этом возможны два варианта, удовлетворяющие условия согласования: первый, при котором $\delta\mathbf{Z}$ относится к неупругой составляющей

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \right\rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : \;\; \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \;\; \mathbf{z}' - \mathbf{z}^{\mathrm{in}\prime} \;\; \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}'\cdot\boldsymbol{\omega}' \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}' \right\rangle \;\; , \\
&\mathbf{Z}^{\mathrm{e}} = \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle ,
\end{aligned}
\tag{2.66}
$$

второй –к упругой:

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{Z}^{\mathrm{e}} = \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle + \mathbf{\Pi}^{-1} : \;\; \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \mathbf{z}^{\mathrm{e}\prime} \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}'\cdot\boldsymbol{\omega}' \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}' \right\rangle \;\; , \\
&\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \right\rangle .
\end{aligned}
\tag{2.67}
$$

Стоит отметить, что при численной реализации результаты для обоих из приведенных результатов будут одинаковы, различие будет иметь место лишь в значениях и физическом смысле составляющих неголономной меры деформированного состояния.

Для проверки непротиворечивости полученных выражений для составляющих неголономной меры деформаций рассмотрим частный случай изотропии упругих характеристиках на обоих масштабных уровнях. Очевидно, что при использовании изотропного закона Гука флуктуации упругих характеристик будут отсутствовать, $\boldsymbol{\pi}' = \mathbf{0}$, откуда следует равенство $\mathbf{\Pi} \equiv \boldsymbol{\pi}$.В качестве ОС на мезоуровне имеем изотропный закон Гука в виде:

$$
\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \lambda \mathrm{I}_1 \;\; \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \;\; \mathbf{I} + 2\mu\mathbf{z}^{\mathrm{e}},
\tag{2.68}
$$

на макроуровне:

$$\dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Sigma} = \lambda \mathrm{I}_1 \;\; \mathbf{Z}^{\mathrm{e}} \;\; \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{Z}^{\mathrm{e}}. \tag{2.69}$$

Опуская выкладки, придем к выражению:

$$\begin{gathered} \dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Sigma} = \\ = \lambda \mathrm{I}_1 \;\; \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle \;\; \mathbf{I} + 2\mu \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \right\rangle. \end{gathered} \tag{2.70}$$

Тогда упругая составляющая скорости деформаций макроуровня примет вид:

$$\begin{gathered} \mathbf{Z}^{\mathrm{e}} = \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle + \frac{1}{2\mu} \left(\delta\boldsymbol{\sigma} - \frac{\lambda}{3\lambda + 2\mu} \mathrm{I}_1 \;\; \delta\boldsymbol{\sigma} \;\; \mathbf{I} \right), \\ \delta\boldsymbol{\sigma} = \left\langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \right\rangle. \end{gathered} \tag{2.71}$$

При этом ввиду симметрии напряжений:

$$\begin{gathered} \mathrm{I}_1 \;\; \delta\boldsymbol{\sigma} \;\; = \left\langle \boldsymbol{\omega}' : \boldsymbol{\sigma}' \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}' : \boldsymbol{\omega}' \right\rangle = 0, \\ \delta\boldsymbol{\sigma} = \delta\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}}. \end{gathered} \tag{2.72}$$

Из представленных результатов следует, что в изотропном случае полученные связи (2.71) не противоречат априори принятым предположениям (2.57).

На рис. 2.2 приведены зависимости норм тензоров, входящих в полученные соотношения, от нормы полных деформаций для нагружения сдвигом до 50% представительного объема из 1728 кристаллитов с анизотропными упругими свойствами; параметры соответствуют Ст45. Численные расчеты показали (рис. 2.2), что норма добавки $\delta\mathbf{Z} = \mathbf{\Pi}^{-1} : \;\; \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \mathbf{z}^{\mathrm{e}\prime} \right\rangle - \left\langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \right\rangle + \left\langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \right\rangle$ имеет на 3 порядка меньшие значения по сравнению с нормой $\left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \right\rangle$ при полных деформациях свыше 1%. Данное обстоятельство позволяет утверждать, что в случае принятия (2.66), с высокой степенью точности выполняется соотношение $\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \right\rangle$, являющееся основой для получения физического смысла меры деформаций (раздел 3.4). В свою очередь, значение нормы мер средних скоростей упругих деформаций $\left\langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \right\rangle$ не более чем на порядок выше значения нормы $\delta\mathbf{Z}$ при полных деформациях свыше 5%. Данный результат указывает на необходимость учета добавки $\delta\mathbf{Z}$ для установления корректного отклика ПКА в целом. В дальнейшем по умолчанию будет использоваться вариант согласования определяющих соотношений (2.66).

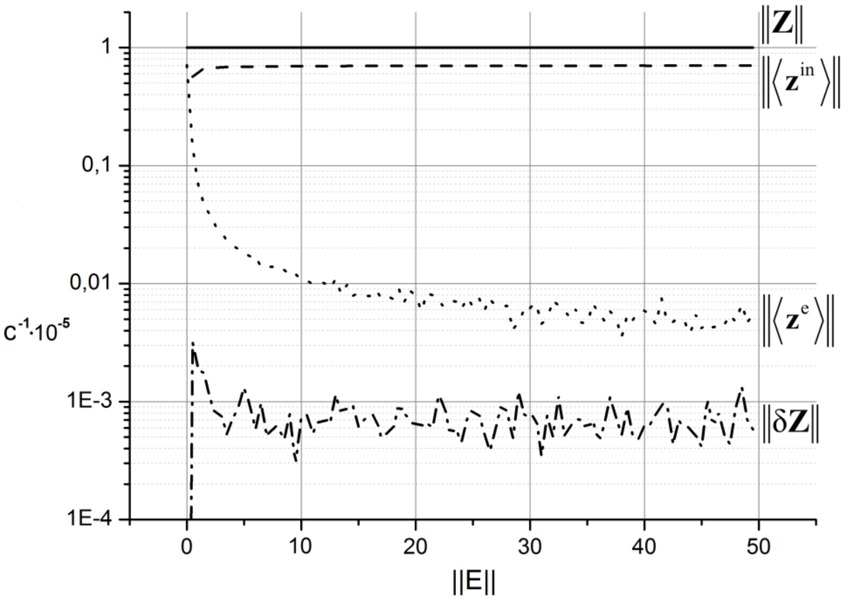

Рис. 2.2. Зависимость норм тензоров от полных деформаций

Отметим, что соотношения (2.57), (2.59) и (2.66) (или (2.67)) являются не единственным вариантом удовлетворения условий согласования. Так, в работе [75] предлагаются иные выражения для спина и скоростей неупругих деформаций макроуровня, удовлетворяющих условиям согласования определяющих соотношений соседних масштабным уровней. Однако при этом может не выполняться условие антисимметричности тензора $\mathbf{\Omega}$, что приводит к необходимости использования в ОС макроуровня конвективной производной вместо коротационной, в связи с чем существенно усложняется формулировка определяющих соотношений макроуровня и объяснение их физического смысла. В случае антисимметричности тензора спина мезоуровня и принятия $(2.57)_1$ тензор спина макроуровня также антисимметричен.

Таким образом, совокупность соотношений (2.29)–(2.32), (2.39), (2.45), (2.52) –(2.55), (2.57) и (2.66), включая конкретные эволюционных уравнения для критических касательных напряжений в системах скольжения и модель ротации мезоуровня, представляют собой полную систему уравнений двухуровневой конститутивной модели, позволяющую получить отклик поликристаллического агрегата при произвольном квазистатическом нагружении.

Глава 3. Модификация двухуровневой модели неупругого деформирования моно- и поликристаллов, основанной на физической теории упруговязкопластичности

Настоящая глава посвящена изложению модификации двухуровневой конститутивной упруговязкопластической модели, общая структура которой представлена в разделе 2.4. Разрабатываемая двухуровневая модель должна с необходимой степенью адекватности описывать процессы интенсивных пластических деформаций, при которых весьма существенны проявления геометрических нелинейностей на обоих рассматриваемых масштабных уровнях; если в случае малых деформаций можно всё движение считать чисто деформационным, то в случае больших градиентов перемещений это совершенно неприемлемо. Как было показано в предыдущей главе, существующие модели не позволяют адекватным и физически обоснованным образом описывать квазитвердое движение как на мезо-, так и на макроуровне, которое необходимо выделять при рассмотрении геометрически нелинейных проблем. Представленные в данной главе модификации относятся к введению физического обоснованного разложения движения на квазитвердое и деформационное на обоих масштабных уровнях. Также рассматриваются смежные вопросы, связанные с определением коротационной производной в определяющих соотношениях и физического смысла неголономной меры деформированного состояния. Представленные здесь теоретические результаты являются оригинальными и не опубликованными до настоящего времени другими авторами.

3.1. Закон Гука в конечной и скоростной формах

Основой любой математической модели является определяющее соотношение, физическая и математическая корректность которого существенным образом влияет на результаты моделирования. В подавляющем большинстве моделей, основанных на физических теориях пластичности, в качестве основного определяющего соотношения используется закон Гука в скоростной релаксационной форме, связывающий коротационную производную тензора напряжений и скорость упругих деформаций посредством тензора упругих свойств четвертого ранга:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}} = \mathbf{п} : \mathbf{d}^{\mathrm{e}}, \tag{3.1}$$

где верхний индекс «cr» означает ту или иную коротационную производную, $\mathbf{п}$– тензор четвертого ранга упругих характеристик, $\mathbf{d}^{\mathrm{e}}$ – упругая составляющая тензора деформации скорости. При формулировке закона в скоростной форме для упругопластических или упруговязкопластических сред используется аддитивное разложение тензора деформации скорости на упругую и неупругую составляющие: $\mathbf{d} = \mathbf{d}^{\mathrm{e}} + \mathbf{d}^{\mathrm{in}}$. Неупругая составляющая на мезоуровне определяется по скоростям сдвигов в системах скольжения, причем для согласования с входящими в аддитивное разложение тензорами $\mathbf{d}$ и $\mathbf{d}^{\mathrm{e}}$ тензор $\mathbf{d}^{\mathrm{in}}$ также симметризуется. Далее полагается, что $\mathbf{d}$ является коротационной производной некоторой меры деформации, причем спин в этой коротационной производной принимается совпадающим с используемым при определении $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}}$. Поскольку при этом (по крайней мере – в явной форме) не обсуждается разложение движения, установить физический (геометрический) смысл получаемой коротационным интегрированием $\mathbf{d}$ меры деформации не представляется возможным.

Исходной посылкой к формулировке ОС в виде (3.1) является классический закон Гука, справедливый, вообще говоря, только для случая малых градиентов перемещений:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{п} : \boldsymbol{\varepsilon}, \tag{3.2}$$

где $\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2}\left(\nabla\mathbf{u} + \nabla\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\right)$ – тензор малых деформаций, $\mathbf{u}$ – вектор перемещений, различием между операторами Гамильтона в отсчетной и актуальной конфигурациях пренебрегается. При этом для данного определяющего соотношения не выполняется условие независимости от выбора системы отсчета.

Обычно закон (3.2) принимается справедливым для любого момента деформирования, и, предполагая непрерывность и дифференцируемость тензоров напряжений и деформаций, от него переходят к скоростной форме: $\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{п} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{п} : \mathbf{d}$.Полученное соотношение тоже не удовлетворяет принципу независимости от выбора системы отсчета в силу неиндифферентности материальной производной тензора напряжений Коши. Для обобщения последнего соотношения на случай упругопластического материала и больших градиентов перемещений материальная производная $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ заменяется на независящую от выбора системы отсчета (коротационную или конвективную) производную $\boldsymbol{\sigma}$, а $\mathbf{d}$ – на упругую составляющую тензора деформации скорости. Следует отметить, что при переходе к скоростной форме неявным образом принято, что $\dot{\mathbf{п}} = \mathbf{0}$. Это предположение может быть принято либо для случая малых градиентов перемещений, либо в предположении изотропии упругих свойств материала; вероятно, данное обстоятельство и является причиной того, что большинство исследователей пользуются моделью изотропного материала. Остановимся несколько подробнее на возникающих вопросах при переходе к скоростной форме упругого закона.

Предположим, что для монокристаллического материала справедливо ОС в конечной форме:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{п} : \boldsymbol{\zeta}, \tag{3.3}$$

где $\boldsymbol{\zeta}$ – произвольный индифферентный, в общем случае нелинейный тензор деформации (например, тензор Генки, определенный в актуальной конфигурации). Следует подчеркнуть, что данный закон устанавливает однозначную связь между тензорами напряжений и деформаций в произвольный момент деформирования. Дифференцируя (3.3), получаем:

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \dot{\mathbf{п}} : \boldsymbol{\zeta} + \mathbf{п} : \dot{\boldsymbol{\zeta}}. \tag{3.4}$$

Рассмотрим первый член правой части. При записи (3.4) в компонентах произвольной подвижной системы координат изменяются как векторы базиса, так и компоненты тензора $\mathbf{п}$, причем закон изменения этих компонент определяется законом движения выбранной подвижной (в общем случае – деформируемой) системы координат. В то же время для системы координат, жестко связанной с материалом (в данном случае – с решеткой), компоненты $\mathbf{п}$ можно считать неизменными; заметим, что неявным образом это предположение используется при формулировке скоростных соотношений в терминах $К_0$.

Используем введенные выше системы координат (2.36): неподвижную ЛСК с базисом) $\mathbf{e}_i$ и подвижную $ПСК_К$, связанную с кристаллографическим направлением и материальной площадкой кристаллита (подробнее – см.раздел 3.3), с базисом $\tilde{\mathbf{e}}_i$, $\boldsymbol{\omega} = \dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i\tilde{\mathbf{e}}_i$ – спин мгновенного вращения базиса $\tilde{\mathbf{e}}_i$ относительно ЛСК. Рассмотрим первое слагаемое правой части:

$$\begin{aligned}
&\dot{\boldsymbol{\pi}} : \boldsymbol{\zeta} = \dot{\pi}_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \\
&+\pi_{ijkl}\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\dot{\tilde{\mathbf{e}}}_l : \boldsymbol{\zeta} = \\
&=\pi_{ijkl}\boldsymbol{\omega}\cdot\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \\
&+\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\boldsymbol{\omega}\cdot\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} + \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}} : \boldsymbol{\zeta},
\end{aligned} \tag{3.5}$$

где учтено, что значения компонент тензора упругих свойств в подвижной системе координат (ПСК) не зависят от времени. Отдельно получим выражения для всех четырех слагаемых соотношения (3.5). Первое и второе слагаемое с учетом справедливости (3.3) преобразуются к виду:

$$\pi_{ijkl}\boldsymbol{\omega}\cdot\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} = \boldsymbol{\omega}\cdot\ \ \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta}\ \ = \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{3.6}$$

$$\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} = \left[\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\ \ \tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta}\ \ \right]\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}. \tag{3.7}$$

Третье слагаемое принимает вид:

$$\begin{aligned}
&\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\boldsymbol{\omega}\cdot\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} = \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\omega_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n\ \cdot\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \boldsymbol{\zeta} = \\
&= \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\omega_{mk}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_l : \zeta_{pq}\tilde{\mathbf{e}}_p\tilde{\mathbf{e}}_q = \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\omega_{mk}\zeta_{pq}\delta_{lp}\delta_{mq} = \\
&= \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\omega_{qk}\zeta_{lq} = \pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l :\ \ \boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ \ = \boldsymbol{\pi} :\ \ \boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ \ ,
\end{aligned} \tag{3.8}$$

где использовано:

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l :\ \ \boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ \ = \tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l :\ \ \zeta_{mp}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_p\cdot\omega_{qn}\tilde{\mathbf{e}}_q\tilde{\mathbf{e}}_n\ \ = \\
&= \tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l :\ \ \zeta_{mq}\omega_{qn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n\ \ = \zeta_{mq}\omega_{qn}\delta_{lm}\delta_{kn} = \zeta_{lq}\omega_{qk}.
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Наконец, четвертое слагаемое может быть трансформировано следующим образом:

$$\begin{aligned}
&\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}:\boldsymbol{\zeta}=\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l\cdot\omega_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_n\tilde{\mathbf{e}}_m:\boldsymbol{\zeta}=\\
&=\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\omega_{ml}\tilde{\mathbf{e}}_m:\zeta_{pq}\tilde{\mathbf{e}}_p\tilde{\mathbf{e}}_q=\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\omega_{ml}\zeta_{pq}\delta_{mp}\delta_{kq}=\\
&=\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\omega_{pl}\zeta_{pk}=\pi_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l:\ \boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\zeta}\ =\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\zeta}\ ,
\end{aligned}\tag{3.10}$$

где использовано:

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l:\ \boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\zeta}\ =\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l:\ \omega_{pq}\tilde{\mathbf{e}}_q\tilde{\mathbf{e}}_p\cdot\zeta_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n\ =\\
&=\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l:\ \omega_{mq}\zeta_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_q\tilde{\mathbf{e}}_n\ =\omega_{mq}\zeta_{mn}\delta_{lq}\delta_{kn}=\omega_{lm}\zeta_{mk}.
\end{aligned}\tag{3.11}$$

Подставляя (3.6) – (3.10) в (3.5), получим:

$$\begin{gathered}
\dot{\boldsymbol{\pi}}:\boldsymbol{\zeta}=\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ +\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\zeta}\ ,\\
\dot{\boldsymbol{\sigma}}=\dot{\boldsymbol{\pi}}:\boldsymbol{\zeta}+\boldsymbol{\pi}:\dot{\boldsymbol{\zeta}}=\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ +\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\zeta}\ +\boldsymbol{\pi}:\dot{\boldsymbol{\zeta}},\\
\dot{\boldsymbol{\sigma}}-\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{\pi}:\dot{\boldsymbol{\zeta}}+\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ +\boldsymbol{\pi}:\ \boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\cdot\boldsymbol{\zeta}\ ,\\
\dot{\boldsymbol{\sigma}}-\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma}+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{\pi}:\ \dot{\boldsymbol{\zeta}}-\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\zeta}+\boldsymbol{\zeta}\cdot\boldsymbol{\omega}\ ,
\end{gathered}\tag{3.12}$$

откуда следует:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}}=\boldsymbol{\pi}:\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{cr}},\tag{3.13}$$

т.е. скоростную форму закона (3.3). Таким образом, показано, что при выполнении для материала закона Гука в конечной форме ОС (3.3) для него справедливо соотношение в скоростной форме (3.13), где для мер напряжений и деформаций используются идентичные коротационные производные (заметим, что в монографии [53] это положение формулировалось как требование «коротационности» мер скоростей напряжений и деформаций). При этом выбор жесткой подвижной системы координат должен обеспечивать неизменность компонент тензора свойств **п** в базисе введенной $\text{ПСК}_{\text{К}}$. При переходе к процессам неупругого деформирования в (3.13) вместо $\boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{cr}}$ следует использовать упругую составляющую меры скорости деформации.

Нетрудно показать справедливость и обратного утверждения: при принятых ограничениях (на определения подвижной системы координат и коротационной производной) из ОС в скоростной форме следует упругий закон в конечной форме. Проведем выкладки в обратном направлении для получения закона Гука для конечных величин из скоростной формы определяющего соотношения:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}} = \mathbf{п} : \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{cr}}, \tag{3.14}$$

где $\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}}$ – коротационная производная тензора напряжений Коши, $\mathbf{п}$– тензор четвертого ранга упругих свойств, $\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\zeta}^{\mathrm{cr}}$ произвольная в общем случае индифферентная мера деформированного состояния и её коротационная производная. Данное соотношение справедливо для неподвижного наблюдателя, связанного с базисом $\mathbf{e}_i$, относительно которого система координат с базисом $\tilde{\mathbf{e}}_i$ совершает жесткое вращение; при этом для жестко связанного с последней подвижного наблюдателя выполняется соотношение:

$$\dot{\sigma}_{ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = п_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \dot{\zeta}_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n. \tag{3.15}$$

Иначе говоря, при рассмотрении процесса деформирования с точки зрения подвижного наблюдателя коротационные производные мер напряжений и деформаций становятся материальными (для подвижного наблюдателя базис $\tilde{\mathbf{e}}_i$ представляется неподвижным). В таком случае, проинтегрировав (3.15) с позиций подвижного наблюдателя, получим:

$$\sigma_{ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j - \sigma_{0ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = п_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \ \zeta_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n - \zeta_{0mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n \ , \tag{3.16}$$

где учтено, что компоненты тензора упругих свойств в базисе $\tilde{\mathbf{e}}_i$, связанном с материалом, не зависят от времени, сам базис $\tilde{\mathbf{e}}_i$ с точки зрения подвижного наблюдателя остается также неизменным. В последнем соотношении $\sigma_{0ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j$, $\zeta_{0mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n$ имеют смысл напряжений и деформаций в отсчетной (естественной) конфигурации, в которой полагается $\zeta_{0ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = \mathbf{0}$, $\sigma_{0ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = \mathbf{0}$. Тогда

$$\begin{aligned}
&\sigma_{ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = п_{ijkl}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j\tilde{\mathbf{e}}_k\tilde{\mathbf{e}}_l : \zeta_{mn}\tilde{\mathbf{e}}_m\tilde{\mathbf{e}}_n,\\
&\sigma_{ij}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j = п_{ijkl}\zeta_{lk}\tilde{\mathbf{e}}_i\tilde{\mathbf{e}}_j,\\
&\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{п} : \boldsymbol{\zeta}.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Стоит отметить, что последнее соотношение, было получено из скоростного ОС путем интегрирования с позиций подвижного и жестко связанного с $ПСК_К$ наблюдателя, при этом было использовано единственное предположение – независимость компонент тензора упругих свойств в базисе жесткой подвижной системы координат от времени.

3.2. Разложение движения на мезоуровне

Выше было неоднократно отмечено, что при формулировании геометрически нелинейных определяющих соотношений на том или ином масштабном уровне, используемых при решении задач неупругого деформирования в случае больших градиентов перемещений, решающее значение имеет физическая корректность разложения движения на квазитвердое и деформационное. Так, на мезоуровне справедливость определяющего соотношения (3.14) достигается лишь в том случае, если квазитвердое движение связано с решеткой, при котором удовлетворяется независимость компонент тензора упругих характеристик в базисе кристаллографической системы координат. Спин $ПСК_К$ входит также в выражение для определения меры скорости деформаций (2.45).

В разделе 2.3 было показано, что существующие модели описания квазитвердого движения исходят либо из кинематики полного движения (тензор вихря), либо из кинематики полного движения за исключением неупругих деформаций. Отмечено, что известные модели ротации относятся к двум широким классам. Первый класс основан на теореме Коши-Гельмгольца. Второй класс моделей использует полярное разложение градиента места. В обоих вариантах жесткая подвижная система координат в общем случае не связана с выделенными материальными элементами (волокнами, площадками) на протяжении всего процесса деформирования, вследствие чего не удовлетворяется свойство неизменности тензора упругих свойств $\mathbf{п}$ с позиций подвижного наблюдателя, следовательно, не представляется возможным доказать эквивалентность упругого закона в конечной и скоростной формах. В связи с этим в данной работе предлагается принципиально новый способ определения квазитвердого движения отдельного кристаллита по известным кинематическим воздействиям.

Рассмотрим предлагаемый способ разложения движения более подробно. Введем декартову кристаллографическую систему координат (КСК) $Oy^1y^2y^3$ с базисом $\mathbf{q}_i$, «вмороженную» в решетку; в отсчетной конфигурации примем эту систему декартовой ортогональной, совместив ее оси, например, для кубической неискаженной решетки с кристаллографическими направлениями [100], [010], [001]. При произвольном движении деформируемого кристалла этот триэдр $\mathbf{q}_i$ будет претерпевать как повороты, так и искажения, т.е. его ортонормированность будет нарушаться; заметим, что для кристаллических металлов и сплавов собственно искажения будут малыми.

Наряду с КСК введем жесткую декартову ортогональную подвижную систему координат ($ПСК_К$) $Ox^1x^2x^3$ с ортонормированным базисом $\mathbf{k}_i$, в отсчетной конфигурации совпадающую с КСК и связанную с КСК в течение всего процесса деформирования. Связь осуществим следующим образом: оси Oy^1 и Ox^1 будем считать совпадающими в каждый момент времени (вектор $\mathbf{k}_1$ направлен вдоль вектора $\mathbf{q}_1$); вектор $\mathbf{k}_2$ в каждый момент деформирования будем располагать в плоскости Oy^1y^2. Зная в каждый момент времени положение векторов $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$, легко определяется положение третьего базисного вектора ПСК: $\mathbf{k}_3=\mathbf{k}_1\times \mathbf{k}_2$. Поскольку оси $ПСК_К$ в данном случае связаны с материалом, для определения положения осей $Ox^1x^2x^3$ в произвольной актуальной конфигурации K_t достаточно знать начальную ориентацию КСК относительно ЛСК и соответствующий рассматриваемому моменту t времени градиент места $\nabla\mathbf{r}$. Однако для поставленных в работе целей больший интерес представляют скоростные характеристики движения ПСК, поэтому обратимся к определению спина $ПСК_К$ $\boldsymbol{\omega}$ относительно условно неподвижной ЛСК.

Рассмотрим произвольный момент процесса деформирования, для которого известны текущее положение триэдра $\mathbf{k}_i$ и градиент скорости перемещений. При этом в каждый момент времени направления векторов $\mathbf{q}_1$ (КСК) и $\mathbf{k}_1$ ($ПСК_К$) будут совпадать, а все материальные векторы из плоскости (в т.ч. вектор, совпадающий в текущий момент с $\mathbf{k}_2$), образуемой $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$ на протяжении всего процесса должны оставаться в одной материальной плоскости в силу аффинности преобразований. Вектор ПСК$_\text{К}$ $\mathbf{k}_3$ представляет собой нормаль к материальной площадке, образуемой $\mathbf{q}_1$ и $\mathbf{q}_2$.

Заметим, что в настоящей работе основным механизмом неупругой деформации принимается скольжение краевых дислокаций, не приводящее к изменению ориентаций КСК, в связи с чем для определения скорости ротации ПСК$_\text{К}$ необходимо использовать только упругую составляющую градиента скорости перемещений $\nabla\mathbf{v}^\text{e}$. Тензор спина определяется соотношением:

$$\boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{k}}_i\mathbf{k}_i, \quad \boldsymbol{\omega}^\text{T} = \mathbf{k}_i\dot{\mathbf{k}}_i. \tag{3.18}$$

Используя физический смысл градиента скорости перемещений [53], несложно определить скорость изменения материальных отрезков, совпадающих в данный момент времени с ортами $\mathbf{k}_i$; однако следует иметь в виду, что движение материальных отрезков не совпадает с движениями векторов ортонормированного базиса. Действительно, для базиса ПСК должны выполняться условия:

$$\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_i = 1, \ \cancel{\sum_i}, \quad \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{k}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = \overline{1,3}, \tag{3.19}$$

откуда следует:

$$\mathbf{k}_i \cdot \dot{\mathbf{k}}_i = 0, \ \cancel{\sum_i}, \quad \mathbf{k}_i \cdot \dot{\mathbf{k}}_j + \dot{\mathbf{k}}_i \cdot \mathbf{k}_j = 0, \quad i, j = \overline{1,3}. \tag{3.20}$$

Для определения $\dot{\mathbf{k}}_i$ можно воспользоваться различными алгоритмами; например, можно вначале по $\hat{\nabla}\mathbf{v}^\text{e}$ определить $\dot{\mathbf{k}}_1$ при наложении условия $(3.19)_1$ (или $(3.20)_1$), откуда с учетом $(3.20)_2$ – проекции $\dot{\mathbf{k}}_2$ и $\dot{\mathbf{k}}_3$ на $\mathbf{k}_1$. Далее по $\hat{\nabla}\mathbf{v}^\text{e}$ определяется проекция $\dot{\mathbf{k}}_2$ на $\mathbf{k}_3$, одновременно из $(3.20)_2$ устанавливается проекция $\dot{\mathbf{k}}_3$ на $\mathbf{k}_2$, что и завершает определение $\dot{\mathbf{k}}_i$. Другой возможный вариант – определение вначале по описанному выше способу $\dot{\mathbf{k}}_1$, затем – $\dot{\mathbf{k}}_3$ как нормали к материальной площадке, составляемой векторами $\mathbf{k}_1$ и $\mathbf{k}_2$ [53]. Оба способа дают одинаковый результат:

$$
\begin{aligned}
&\dot{\mathbf{k}}_1 = (\mathbf{I} - \mathbf{k}_1\mathbf{k}_1) \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_1,\\
&\dot{\mathbf{k}}_2 = -(\mathbf{k}_2 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_1)\,\mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_2)\,\mathbf{k}_3,\\
&\dot{\mathbf{k}}_3 = -\mathbf{k}_3 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot (\mathbf{I} - \mathbf{k}_3\mathbf{k}_3),
\end{aligned}
\tag{3.21}
$$

где $\mathbf{I}$ – единичный тензор. Таким образом, в каждый момент деформирования тензор спина полностью определяется ориентациями векторов базиса ПСК и упругой составляющей градиента скорости перемещений:

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{k}}_i\mathbf{k}_i = &-(\mathbf{k}_2 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_1)\,\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 - (\mathbf{k}_3 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_1)\,\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 +\\
&+(\mathbf{k}_2 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_1)\,\mathbf{k}_2\mathbf{k}_1 - (\mathbf{k}_3 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_2)\,\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3 +\\
&+(\mathbf{k}_3 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_1)\,\mathbf{k}_3\mathbf{k}_1 + (\mathbf{k}_3 \cdot \hat{\nabla}\mathbf{v}^{\mathrm{eT}} \cdot \mathbf{k}_2)\,\mathbf{k}_3\mathbf{k}_2,
\end{aligned}
\tag{3.22}
$$

или в другой записи:

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} 0 & -l^{\mathrm{e}}_{21} & -l^{\mathrm{e}}_{31} \\ l^{\mathrm{e}}_{21} & 0 & -l^{\mathrm{e}}_{32} \\ l^{\mathrm{e}}_{31} & l^{\mathrm{e}}_{32} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{k}_i\mathbf{k}_j, i, j = \overline{1,3},\\
&\mathbf{l}^{\mathrm{e}} = \nabla\mathbf{v}^{\mathrm{eT}}.
\end{aligned}
\tag{3.23}
$$

Используя полученные выше результаты, для монокристаллического материала можно сформулировать аналог теоремы Коши – Гельмгольца: скорость произвольной частицы $\mathbf{r}$ из малой окрестности частицы $\mathbf{r}_0$ однородно (аффинным образом) деформируемого монокристалла в каждый момент времени можно представить совокупностью квазитвердого поступательного ($\mathbf{v}_0$) и вращательного $\boldsymbol{\omega}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ движения и деформационного движения $\mathbf{z}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, где $\mathbf{r}_0$ – материальная частица, выбранная за полюс:

$$
\mathbf{v} = \mathbf{v}_0 + \boldsymbol{\omega}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) + \mathbf{z}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0). \tag{3.24}
$$

В случае произвольного движения монокристаллического тела для материалов первого порядка аналогичное разложение следует вводить для любой выделенной частицы с малой окрестностью (представительного объема).

3.3. Геометрически нелинейные определяющие соотношения и разложение движения на макроуровне

Большой интерес механиков к построению ОС для описания геометрически нелинейных процессов, всплеск которого наблюдался в 70-х – 80-х годах XX века [53], имеет место и в настоящее время [43, 51, 57, 58]. Исследователями были предприняты многочисленные попытки построения макрофеноменологических ОС, основанных, как правило, на обобщении соответствующих геометрически линейных соотношений. В качестве базовых в большинстве случаев использовались ОС в дифференциальной форме (обычно – квазилинейные), связывающие материальную скорость изменения тензора напряжений с тензором скорости той или иной меры деформации. Наиболее распространенными исходными соотношениями были ОС, связывающие скорость изменения тензора напряжений Коши $\mathbf{\Sigma}$ с тензором деформации скорости $\mathbf{D}$ (симметричной частью градиента скорости перемещений $\hat{\nabla}\mathbf{V}$, определенного в K_t). Для удовлетворения принципа независимости от выбора системы отсчета [63] неиндифферентную меру $\dot{\mathbf{\Sigma}}$ заменяли на индифферентную (конвективную или коротационную) производную тензора напряжений Коши $\mathbf{\Sigma}$; чаще всего предлагалось использовать производную Яуманна (Зарембы – Яуманна) [113,149] $\mathbf{\Sigma}^J = \dot{\mathbf{\Sigma}} - \mathbf{W}\cdot\mathbf{\Sigma} + \mathbf{\Sigma}\cdot\mathbf{W}$, где $\mathbf{W}$ – тензор вихря (антисимметричная составляющая градиента скорости перемещений). Реже применялись коротационная «нейтральная» производная [108] и конвективные производные (типа Олдройда [128] или Коттер и Ривлина [96]).

Конечно, в этом случае полученные ОС удовлетворяли принципу независимости от выбора системы отсчета, однако физическое обоснование подобных соотношений, как правило, даже не обсуждалось. Вероятно, данное обстоятельство явилось одной из основных причин проявления «нефизичных» результатов, например, появление осциллирующих напряжений в задаче монотонного деформирования простым сдвигом [98, 121, 127].

Как представляется, одной из основных проблем построения геометрически нелинейных ОС является не выполнение принципа независимости от выбора системы отсчета (которому можно легко удовлетворить множеством мощности континуум способов [53] заменой $\dot{\mathbf{\Sigma}}$ на индифферентную конвективную или коротационную производную тензора напряжений Коши $\mathbf{\Sigma}$), а физически обоснованное выделение в общем произвольном движении деформируемой среды составляющей, отвечающей за движение тела как жесткого целого. Иначе говоря, необходимо ввести некоторую подвижную систему координат (ПСК), которая при наложении чисто жесткого движения будет воспроизводить именно это движение; в этом случае скорость изменения любых анализируемых величин относительно ПСК будет независящей от выбора системы отсчета. Этому свойству, конечно, удовлетворяет лагранжева вмороженная система координат (использование такой ПСК приводит к производной Олдройда [128] или Коттер и Ривлина [96]). Однако для того, чтобы иметь возможность сопоставлять между собой изменения мер напряженного и деформированного состояния на различных этапах нагружения, что в реальных расчетах возможно только по компонентам данных мер, введенная ПСК должна быть жесткой, недеформируемой (желательно – декартовой ортогональной). С другой стороны, для материалов с памятью используемая ПСК должна быть связана (в определенном смысле – теснейшим образом) с материалом, для которого, собственно, и формулируются ОС. Поскольку в произвольно деформируемой среде для ПО любого уровня (за исключением некоторых весьма частных случаев, например, растяжений – сжатий вдоль одной и той же тройки ортогональных материальных волокон) отсутствует единая на протяжении всего исследуемого процесса жесткая система координат с векторами базиса, направленными вдоль одних и тех же взаимно ортогональных материальных волокон, два последних требования противоречат друг другу.

В связи с вышесказанным, в механике деформируемого твердого тела (МДТТ) разложение движения на жесткое (корректнее называть его квазитвердым) и деформационное осуществляется по соглашению. При этом собственно о разложении движения при введении ПСК, как правило, ничего не говорится, обсуждаются только кинематические аспекты принимаемого соглашения. Наиболее распространенным является разложение движения на основе теоремы Коши –

Гельмгольца; заметим, что именно этот способ приводит к необходимости использования производной Зарембы–Яуманна. Из физического смысла разложения движения по теореме Коши – Гельмгольца следует, что мгновенное движение представляется растяжением – сжатием вдоль трех материальных волокон, совпадающих в рассматриваемый момент с главными осями тензора деформации скорости **D**, и мгновенного вращения, определяемого тензором вихря **W** [60]. Казалось бы, оси ПСК можно направить вдоль главных осей тензора **D**, однако в общем случае движения в следующий момент времени с главными осями **D** будет совпадать совсем другая тройка материальных волокон, а оси ПСК для выполнения требования жесткости должны будут изменить свое положение относительно первоначально связанных с ними материальных волокон. Из этого обстоятельства следует, что данный способ разложения движения может быть применен только для материалов с мгновенно затухающей памятью (например, вязких жидкостей), когда отклик (напряжения) зависит только от текущих градиентов скоростей кинематических воздействий, на него не влияет мера накопленного собственно деформационного движения и поэтому в ее корректном определении нет необходимости.

Для описания поведения деформируемых сред с памятью требуется знание истории параметров воздействий (например, деформаций) на довольно продолжительных интервалах времени. Как уже отмечалось выше, история воздействий должна быть отражена в терминах компонент соответствующих тензоров, определяемых в неизменном базисе, связанном с материалом. В силу вышесказанного следует, что разложение движения по теореме Коши – Гельмгольца неприемлемо для таких сред.

Возникает вопрос о конкретном выборе ПСК, пригодном для описания поведения материалов с длительной памятью. На настоящий момент отсутствуют строго регламентированные правила определения таких ПСК, и нет уверенности, что они могут быть установлены. Для любого конкретного материала (или класса материалов) данный выбор должен опираться на тщательный физический анализ структуры исследуемой среды и рациональные рассуждения. Представляется целесообразным выбирать ПСК связанными с материальными элементами, наименее всего подвергаемыми искажениям в процессе деформирования. При этом желательно, чтобы оси ПСК наилучшим образом отражали симметрийные свойства материала. Следует подчеркнуть, что ПСК вводятся для каждого представительного объема на каждом масштабном уровне. При этом для обозначения подвижной системы координат безотносительно к какому-либо масштабному уровню, будет использоваться аббревиатура ПСК, при обозначении ПСК представительного объема мезоуровня (кристаллита) – ПСК$_К$, макроуровня (представительного макрообъема) – ПСК$_П$.

Для большинства кристаллических материалов (в первую очередь – металлов и сплавов) относительно правильное строение кристаллитов (зерен, субзерен, фрагментов) сохраняется при значительных неупругих деформациях (порядка сотен процентов) и температурах. В связи с этим для данного класса материалов (моно- и поликристаллов) на мезоуровне в качестве ПСК$_К$ представляется обоснованным использовать систему координат, связанную с кристаллической решеткой. Конкретный способ «привязки» жесткой ПСК$_К$ к искажаемой (хотя и незначительно) кристаллической решетке был подробно рассмотрен выше в разделе 3.2. Спин (тензор 2-го ранга, ассоциированный с вектором скорости вращения) мезоуровня далее будет обозначаться как $\boldsymbol{\omega}$. Более сложным является способ введения жесткой ПСК для представительного макрообъема (ПСК$_П$)поликристаллического материала; спин этой системы координат будет обозначаться как $\boldsymbol{\Omega}$.

Следует заметить, что заманчивым, на первый взгляд, представляется формулировка ОС в терминах отсчетной конфигурации $К_0$. Действительно, в этом случае не возникает проблемы разложения движения, используемые меры напряжений и деформаций, равно как их производные, являются инвариантными по отношению к наложенному жесткому движению [53]. Однако обычно используемые при построении ОС в терминах $К_0$ меры напряжений и скорости деформаций не имеют ясного физического смысла, что затрудняет анализ получаемых соотношений. Кроме того, для материалов с памятью в этом случае необходимо будет учитывать всю предысторию деформирования, что требует использования в качестве ОС функциональных или операторных уравнений. В то же время практически все неупруго деформируемые материалы обладают другим весьма важным свойством – затухания памяти. Это позволяет при построении ОС в терминах актуальной конфигурации K_t учитывать только незначительную часть предыстории деформирования, поэтому в дальнейшем рассмотрение будет ограничено ОС, формулируемыми в терминах K_t.

В связи с тем, что выделение квазитвердого движения на макроуровне осуществляется лишь по некоторому соглашению, в дальнейшем те или иные способы описания будем называть гипотезами о разложении движения. Исторически первыми были сформулированы геометрически линейные определяющие соотношения для случая малых градиентов перемещений (малых деформаций). При этом квазитвердым движением пренебрегается, всё движение полагается чисто деформационным. Соответствующую гипотезу в дальнейшем будем обозначать Γ_0. Гипотезу, соответствующую разложению по теореме Коши-Гельмгольца, используемую при формулировке подавляющего большинства геометрически нелинейных ОС теорий упруго(вязко)пластичности, обозначим как Γ_W. В качестве альтернативы существующим способам разложения движения на макроуровне предлагается способ (гипотеза Γ_Ω), основанный на условии согласования определяющих соотношений макро- и мезоуровней (2.57), (2.66), в соответствии с которым спин квазитвердого движения на макроуровне равен среднему значению спинов элементов мезоуровня $\mathbf{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle$. В свою очередь спин мезоуровня определяется, вообще говоря, физически обоснованной моделью ротации, при этом корректность определения спина мезоуровня будет отражаться на физической адекватности описания квазитвердого движения на макроуровне.

Стоит отметить, что в случае принятия гипотезы Γ_W из условия согласования следует жесткое ограничение, накладываемое на модель ротации мезоуровня [71]; приведем необходимые выкладки для пояснения данного утверждения. В этом случае определяющее соотношение макроуровня примет вид:

$$\mathbf{\Sigma}^{\mathrm{CR}} = \dot{\mathbf{\Sigma}} + \mathbf{\Sigma}\cdot\mathbf{W} - \mathbf{W}\cdot\mathbf{\Sigma} = \mathbf{\Pi} : \ \mathbf{Z} - \mathbf{Z}^{\mathrm{in}} \ , \qquad (3.25)$$

мезоуровня:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\pi} : \ \mathbf{z} - \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \ , \qquad (3.26)$$

где $\boldsymbol{\omega}$ – тензор спина, определяемый некоторой моделью ротации. Следуя условиям согласования (раздел 2.4), априорные соотношения (2.57), связывающие средние значения характеристик мезоуровня и макроуровня, примут вид:

$$\begin{aligned} &\mathbf{W} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \\ &\mathbf{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \\ &\mathbf{\Pi} = \langle \boldsymbol{\pi} \rangle. \end{aligned} \qquad (3.27)$$

Опуская выкладки, которые практически будут повторять (2.56)–(2.64), получим:

$$\begin{aligned} &\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : \ \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \mathbf{z}^{\mathrm{e}\prime} \right\rangle - \langle \boldsymbol{\sigma}'\cdot\boldsymbol{\omega}' \rangle + \langle \boldsymbol{\omega}'\cdot\boldsymbol{\sigma}' \rangle \ , \\ &\mathbf{Z}^{\mathrm{e}} = \langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \rangle. \end{aligned} \qquad (3.28)$$

Соотношение $(3.27)_1$требует, чтобы среднее значение спинов мезоуровня, определяемых моделью ротации, было в точности равно тензору вихря полного движения макроуровня. Очевидно, что данное условие при произвольном нагружении может выполняться только при равенстве спина каждого кристаллита, входящего в ПКА, тензору вихря $\mathbf{W}$. При этом отклонение тензоров спина $\boldsymbol{\omega}$ от среднего значения будет тривиальным $\boldsymbol{\omega}' = \mathbf{0}$, что приводит к трансформации $(3.27)_1$ и (3.28) к виду:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\omega} = \mathbf{W}, \\ &\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \rangle - \mathbf{\Pi}^{-1} : \left\langle \boldsymbol{\pi}' : \mathbf{z}^{\mathrm{e}\prime} \right\rangle, \\ &\mathbf{Z}^{\mathrm{e}} = \langle \mathbf{z}^{\mathrm{e}} \rangle. \end{aligned} \qquad (3.29)$$

Таким образом, в случае принятия гипотезы Γ_{W} происходит «навязывание» квазитвердого движения на мезоуровне с верхнего масштабного уровня, игнорируя при этом законы эволюции внутренней микроструктуры, определяемые физическими механизмами на мезо- и микроуровне.

Стоит отметить, что в случае использования гипотезы Γ_0 ОС макроуровня примет вид:

$$\dot{\boldsymbol{\Sigma}} = \boldsymbol{\Pi} : \ \mathbf{Z} - \mathbf{Z}^{\mathrm{in}} \ , \tag{3.30}$$

ОС мезоуровня остается без изменений при выборе любой из рассматриваемых гипотез о разложении движения на макроуровне:

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{cr}} = \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\pi} : \ \mathbf{z} - \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \ . \tag{3.31}$$

Из условий согласования ОС макро и мезоуровней следует выражение:

$$\boldsymbol{\Sigma} \cdot \langle \boldsymbol{\omega} \rangle - \langle \boldsymbol{\omega} \rangle \cdot \boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{0}, \tag{3.32}$$

связывающее средние значения спина мезоуровня и эффективные напряжения макроуровня. Ввиду того, что данное выражение должно выполняться для произвольного момента нагружения поликристаллического агрегата, отсутствует возможность произвольного выбора модели описания квазитвердого движения на мезоуровне. Действительно, представив величины, входящие в (3.32), в компонентах триэдра собственных векторов тензора $\boldsymbol{\Sigma}$, имеем:

$$\langle \omega \rangle_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \langle \omega \rangle_{12} & \langle \omega \rangle_{13} \\ -\langle \omega \rangle_{12} & 0 & \langle \omega \rangle_{23} \\ -\langle \omega \rangle_{13} & -\langle \omega \rangle_{23} & 0 \end{pmatrix}; \quad \Sigma_{ij} = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_2 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_3 \end{pmatrix}, \tag{3.33}$$

получим систему линейных алгебраических уравнений относительно трех независимых компонент тензора $\langle \boldsymbol{\omega} \rangle$:

$$\begin{pmatrix} \Sigma_1 - \Sigma_2 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma_1 - \Sigma_3 & 0 \\ 0 & 0 & \Sigma_2 - \Sigma_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \omega \rangle_{12} \\ \langle \omega \rangle_{13} \\ \langle \omega \rangle_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.34}$$

Полученное соотношение должно выполняться при любом достигнутом к рассматриваемому моменту напряженном состоянии, т.е детерминант матрицы может принимать любые значения. Тогда в произвольный момент нагружения система уравнений (3.34) имеет единственное тривиальное решение:

$\langle\omega\rangle_{12}=\langle\omega\rangle_{13}=\langle\omega\rangle_{23}=0$. Иначе говоря, при использовании исходного предположения о пренебрежении квазитвердым движением и отнесении движения к чисто деформационному не может быть реализовано вращение ПСК$_К$, а следовательно, отсутствует возможность образования текстуры, что находится в противоречии с экспериментальными данными.

Совершенно иная ситуация складывается при использовании гипотезы Γ_Ω. В этом случае квазитвердое движение на мезоуровне считается произвольным (в том смысле, что спин $\boldsymbol{\omega}$ не связан жестко с квазитвердым движением на макроуровне), что подразумевает свободный выбор модели ротации мезоуровня исходя исключительно из физических механизмов, управляющих эволюцией микроструктуры материала. Спин макроуровня, принимая значение, равное осредненному спину мезоуровня, отражает характер эволюции внутренней структуры материала.

3.4. Физический смысл меры деформированного состояния

В МДТТ традиционно применяются симметричные меры деформаций и скоростей деформаций. Однако симметризация мер исключает из меры деформации любое ротационное движение, так что задание меры деформации или скорости деформации, определенных в актуальной конфигурации, не позволяет полностью восстановить движение представительного объема рассматриваемого масштабного уровня. В связи с этим В. Прагер отмечал [54], что введение мер и тензоров деформации ничего не добавляет (в смысле полноты информации о деформировании) к градиенту места $\overset{\circ}{\boldsymbol{\nabla}}\mathbf{r}$, где $\overset{\circ}{\boldsymbol{\nabla}}$ – оператор Гамильтона, определенный в К$_0$, $\mathbf{r}$ – радиус – вектор частицы. В качестве меры скорости деформации при построении ОС в терминах К$_t$ можно было бы использовать градиент скорости перемещений, определенный в актуальной конфигурации $\hat{\boldsymbol{\nabla}}\mathbf{v}$, однако данная мера не обладает свойством индифферентности [38]. Ранее была предложена индифферентная мера скорости деформации [67,73] (подробные выкладки приведены в разделе 2.4). На мезоуровне указанная мера определяется соотношением $\mathbf{z}=\tilde{\boldsymbol{\nabla}}\mathbf{v}_r^{\mathrm{T}}=\hat{\boldsymbol{\nabla}}\mathbf{v}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{\omega}$, где

$\hat{\nabla}$ – оператор Гамильтона, определенный в терминах актуальной конфигурации, нижний индекс «r» означает относительные характеристики (определяемые наблюдателем в соответствующей ПСК), $\boldsymbol{\omega}$ – спин ПСК$_К$. На мезоуровне ПСК$_К$ полагается связанной с кристаллографической системой координат (КСК), детальное определение ПСК$_К$ и спина рассмотрено выше в разделе 3.2 (для мезоуровня) и в разделе 3.3 (для макроуровня).

Заметим, что $\mathbf{v}_r = \dot{\mathbf{r}}_r$, где $\mathbf{r}_r$ – «относительный» радиус–вектор частицы, т.е. радиус–вектор, определяемый наблюдателем в ПСК$_К$, с позиций этого же наблюдателя определяется полная производная по времени, обозначаемая точкой сверху. При этом подвижный наблюдатель не «ощущает» движения «своей» системы координат, она для него неподвижна. Однако при этом подвижный наблюдатель пользуется жесткой системой; по сути, речь идет об описании движения в локальной эйлеровой системе отсчета. В силу этого

$$\mathbf{v}_r = \frac{\mathrm{d}\mathbf{u}_r}{\mathrm{dt}} = \frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial \mathrm{t}} + \mathbf{v}_r \cdot \hat{\nabla}\mathbf{u}_r, \tag{3.35}$$

или

$$\mathbf{v}_r = \frac{\partial \mathbf{u}_r}{\partial \mathrm{t}} \cdot \left(\mathbf{I} - \hat{\nabla}\mathbf{u}_r\right)^{-1}, \tag{3.36}$$

где $\mathbf{u}_r = \mathbf{r}_r - \mathbf{r}_{r0}$ – вектор перемещения в относительном движении, $\mathbf{I}$ – единичный тензор второго ранга. Транспонированный градиент $\hat{\nabla}\mathbf{v}_r^{\mathrm{T}}$ от скорости относительных перемещений (3.36) представляет собой меру скорости изменения деформированного состояния $\mathbf{z}$. Данную меру не удалось проинтегрировать в квадратурах, вследствие чего не представляется возможным определить интегральную меру деформации через градиент вектора относительных перемещений $\mathbf{u}_r$.

Определим тензор деформации коротационным интегрированием (т.е. интегрированием по времени с позиций подвижного наблюдателя) соответствующей меры скорости деформации: $\mathbf{e} = \int_0^{\mathrm{t}} \mathbf{z}\mathrm{d}\tau$. Нетрудно показать индифферентность меры $\mathbf{e}$ (равно как $\mathbf{z}$): любое наложенное жесткое движение среды «поглощается» движением ПСК$_К$. Как отмечено выше, получить соотношение для **e** в квадратурах не удается, в связи с чем покажем её физический смысл в пренебрежении упругим искажением кристаллической решетки по сравнению со сдвигами по системам скольжения, что с достаточной степенью обоснованности выполняется для подавляющего большинства металлов и сплавов в случае больших градиентов перемещений.

Напомним, что коротационная производная тензорзначной функции определяется как скорость изменения рассматриваемой тензорной величины, фиксируемой наблюдателем в жесткой подвижной системе координат, т.е. в данном случае:

$$\mathbf{e}_{\omega}^{(n)\mathrm{cor}} \quad \tilde{\mathbf{k}}_i \; = \dot{\hat{e}}_{ij}^{(n)} \tilde{\mathbf{k}}^{(n)i} \tilde{\mathbf{k}}^{(n)j}, \tag{3.37}$$

где $\tilde{\mathbf{k}}^{(n)i}$ – векторы базиса подвижно системы координат (ПСК$_К$) n-го кристаллита. В случае пренебрежимой малости упругих искажений, опуская индекс кристаллита n, из(3.37) получаем:

$$\mathbf{e}_{\omega}^{\mathrm{cor}} \quad \tilde{\mathbf{k}}_i \; = \dot{\hat{e}}_{ij} \tilde{\mathbf{k}}^{i} \tilde{\mathbf{k}}^{j} = \mathbf{z} \approx \mathbf{z}^{\mathrm{in}} = \sum_{k=1}^{M} \dot{\gamma}^{(k)} \tilde{\mathbf{n}}^{(k)} \tilde{\mathbf{b}}^{(k)}, \tag{3.38}$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$, $\tilde{\mathbf{n}}^{(k)}$, $\tilde{\mathbf{b}}^{(k)}$ – скорость сдвига, вектор нормали и вектор Бюргерса k-ой системы скольжения, определенные в ПСК$_К$, M– число активных СС в рассматриваемом кристаллите. Из соотношения (3.38) путем коротационного интегрирования (т.е. интегрирования с позиций наблюдателя, движущегося вместе с кристаллической решеткой) получаем, что изменение меры деформированного состояния в произвольный момент времени определяется соотношением:

$$\mathbf{e}\;\; t \; - \mathbf{e}\;\; 0 \;\; \approx \sum_{k=1}^{M} \gamma^{(k)} \;\; t \;\; \tilde{\mathbf{n}}^{(k)} \tilde{\mathbf{b}}^{(k)} - \sum_{k=1}^{M} \gamma^{(k)} \;\; 0 \;\; \tilde{\mathbf{n}}^{(k)} \tilde{\mathbf{b}}^{(k)} = \sum_{k=1}^{M} \gamma^{(k)} \tilde{\mathbf{n}}^{(k)} \tilde{\mathbf{b}}^{(k)}, \tag{3.39}$$

где учтено, что в отсчётной конфигурации кристаллиты принимаются недеформированными и сдвиги по всем СС отсутствуют. Таким образом, мера **e** имеет вполне ясный физический смысл: в каждый момент деформирования tразность $\mathbf{e}\;\; t \; - \mathbf{e}\;\; 0$ равна сумме по всем системам скольжения кристаллита произведений накопленных сдвигов на базисные диады данных СС.

На макроуровне для определения неголономной меры деформации используется следующее соотношение:

$$\mathbf{E}^{\mathrm{COR}} \equiv \dot{\mathbf{E}} + \mathbf{E}\cdot\mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega}\cdot\mathbf{E} = \mathbf{Z} = \nabla\mathbf{V}^{\mathrm{T}} - \mathbf{\Omega}\,. \qquad (3.40)$$

Попытаемся показать физический смысл введенной меры деформации **E**. Перепишем коротационную производную аналогично (3.37):

$$\mathbf{E}^{\mathrm{COR}} = \dot{\bar{\mathrm{E}}}_{ij}\bar{\mathbf{k}}^{i}\bar{\mathbf{k}}^{j}, \qquad (3.41)$$

где $\bar{\mathbf{k}}^{i}$ – векторы базиса ПСК$_{\Pi}$, черта сверху здесь и далее означает определение величин в терминах ПСК$_{\Pi}$. При этом наблюдатель в ПСК$_{\Pi}$ «не замечает» движения «своей» системы координат, для него базис $\bar{\mathbf{k}}^{i}$ неподвижен. Но именно компоненты меры **E**, определяемые наблюдателем в ПСК, и являются истинной мерой деформации, из которой исключены любые движения ПО как жесткого целого; эта мера должна вычисляться коротационным интегрированием **Z**, которое с позиций наблюдателя в ПСК$_{\Pi}$ переходит в обычное интегрирование по времени. Как отмечено выше, физический смысл компонент $\tilde{\mathrm{e}}_{ij}^{(n)}$ меры деформации в пренебрежении упругими искажениями решетки вполне определен.

Получим связь меры скорости деформированного состояния макроуровня со значениями соответствующих мер элементов мезоуровня. Принимая во внимание условие согласования напряженно-деформированного состояния (2.59)$_3$, получим:

$$\mathbf{E}^{\mathrm{COR}} = \dot{\bar{\mathrm{E}}}_{ij}\bar{\mathbf{k}}^{i}\bar{\mathbf{k}}^{j} = \left\langle \mathbf{e}_{\omega}^{(n)\mathrm{cor}} \right\rangle = \left\langle \dot{\tilde{\mathrm{e}}}_{ij}^{(n)}\tilde{\mathbf{k}}^{(n)i}\tilde{\mathbf{k}}^{(n)j} \right\rangle. \qquad (3.42)$$

Требуется проинтегрировать это соотношение. Заметим, что в предлагаемой модели напряженно-деформированное состояние в пределах элемента мезоуровня полагается однородным; при переходе к описанию поведения кристаллитов с использованием элементов повышенных порядков зависимость от координат также можно исключить переходом к рассмотрению точек интегрирования. В силу вышесказанного все функции правой части можно рассматривать только как функции времени.

Основной проблемой является интегрирование правой части, в которой функциями времени являются и компоненты $\dot{\tilde{e}}_{ij}^{(n)}$, и векторы базиса $\tilde{\mathbf{k}}^{(n)i}$ (даже с позиций наблюдателя в ПСК$_П$, причем надо помнить, что ПСК$_П$ сама совершает движение относительно условно неподвижной ЛСК). Хотя время во всех введенных системах отсчета принято одинаковым, в левой и правой частях (3.42) материальные производные устанавливаются от компонент, определенных разными наблюдателями, движущимися относительно друг друга. Требуется перейти и в правой части к скоростям, которые фиксирует наблюдатель в ПСК$_П$, тогда появляется возможность провести интегрирование по времени с позиций единого наблюдателя ПСК$_П$, считающего свою систему неподвижной. При этом наблюдатель в ПСК$_П$ вообще не предполагает наличия какой-либо другой «абсолютной» системы отсчета (в данном случае – ЛСК).

В основу определения меры деформации положено разложение движения на квазитвердое и деформационное, под вторым понимается именно движение относительно ПСК$_П$. Таким образом, нам требуется перейти к интегрированию (по времени) соотношений с позиций наблюдателя в ПСК$_П$, считающего свою систему неподвижной. Прежде чем перейти к интегрированию, приведем некоторые необходимые для дальнейших выкладок соотношения.

В силу коммутативности операторов суммирования и (материального) дифференцирования по времени выводы можно провести для произвольно выбранного элемента мезоуровня (кристаллита). Для элемента мезоуровня (номер элемента для краткости записи в дальнейшем будет опущен) можно записать:

$$\dot{\tilde{e}}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}(\tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j) - \tilde{e}_{ij}\dot{\tilde{\mathbf{k}}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j - \tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\dot{\tilde{\mathbf{k}}}^j. \qquad (3.43)$$

Векторы базисов различных систем (ЛСК $\mathbf{k}^i$, ПСК$_П$ $\bar{\mathbf{k}}^i$ и ПСК$_К$ $\tilde{\mathbf{k}}^i$) связаны между собой ортогональными преобразованиями:

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbf{k}}^i = \mathbf{o}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{k}^i = \mathbf{k}^i\cdot\mathbf{o},\ \bar{\mathbf{k}}^i = \mathbf{O}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{k}^i = \mathbf{k}^i\cdot\mathbf{O},\\
&\dot{\tilde{\mathbf{k}}}^i = \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{k}^i = \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{o}\cdot\tilde{\mathbf{k}}^i = \boldsymbol{\omega}\cdot\tilde{\mathbf{k}}^i = -\tilde{\mathbf{k}}^i\cdot\boldsymbol{\omega},\\
&\dot{\bar{\mathbf{k}}}^i = \dot{\mathbf{O}}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{k}^i = \dot{\mathbf{O}}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{O}\cdot\bar{\mathbf{k}}^i = \boldsymbol{\Omega}\cdot\bar{\mathbf{k}}^i,
\end{aligned} \qquad (3.44)$$

где $\dot{\tilde{\mathbf{k}}}^i, \dot{\bar{\mathbf{k}}}^i$ характеризуют мгновенную скорость вращения базисных векторов $\tilde{\mathbf{k}}^i, \bar{\mathbf{k}}^i$ соответственно относительно условно неподвижной лабораторной системы координат; тогда с позиций наблюдателя в ЛСК получим:

$$\dot{\tilde{e}}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}(\tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j) - \boldsymbol{\omega}\cdot\tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j + \tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j\cdot\boldsymbol{\omega}. \tag{3.45}$$

Из $(3.44)_1$ нетрудно получить связь базисных векторов ПСК$_К$ и ПСК$_П$:

$$\tilde{\mathbf{k}}^i = \mathbf{o}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{O}\cdot\bar{\mathbf{k}}^i = \bar{\mathbf{k}}^i\cdot\mathbf{O}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{o}. \tag{3.46}$$

Перейдем к рассмотрению движения с позиций наблюдателя в ПСК$_П$, который считает свою систему отсчета неподвижной. Полученные ранее соотношения остаются справедливыми в силу их независимости от выбора системы отсчета, однако при этом надо учитывать изменения в части скоростей поворотов – теперь вместо спинов относительно ЛСК надо использовать скорости ротации относительно ПСК$_П$.

Введем ортогональный тензор $\mathbf{o}_1$, осуществляющий преобразование базиса ПСК$_П$ в базис ПСК$_К$: $\mathbf{o}_1 = \tilde{\mathbf{k}}_i\bar{\mathbf{k}}_i$, так что $\mathbf{o} = \mathbf{o}_1\cdot\mathbf{O}$. Тогда (3.46) можно записать в виде:

$$\begin{aligned}
&\tilde{\mathbf{k}}^i = \mathbf{o}_1^{\mathrm{T}}\cdot\bar{\mathbf{k}}^i = \bar{\mathbf{k}}^i\cdot\mathbf{o}_1; \ \ \dot{\tilde{\mathbf{k}}}^i = \dot{\mathbf{o}}_1^{\mathrm{T}}\cdot\bar{\mathbf{k}}^i = \bar{\mathbf{k}}^i\cdot\dot{\mathbf{o}}_1,\\
&\dot{\tilde{\mathbf{k}}}^i = \dot{\mathbf{o}}_1^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{o}_1\cdot\mathbf{o}_1^{\mathrm{T}}\cdot\bar{\mathbf{k}}^i = \boldsymbol{\omega}_1\cdot\tilde{\mathbf{k}}^i = -\tilde{\mathbf{k}}^i\cdot\boldsymbol{\omega}_1, \ \ \boldsymbol{\omega}_1 = \dot{\mathbf{o}}_1^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{o}_1,
\end{aligned} \tag{3.47}$$

при этом

$$\boldsymbol{\omega}_1 = \dot{\mathbf{o}}_1^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{o}_1 = \ \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{O} + \mathbf{o}^{\mathrm{T}}\cdot\dot{\mathbf{O}}\ \ \cdot\mathbf{O}^{\mathrm{T}}\cdot\mathbf{o} = \boldsymbol{\omega} - \mathbf{o}\cdot\boldsymbol{\Omega}\cdot\mathbf{o}^{\mathrm{T}}. \tag{3.48}$$

Левая часть (3.45) с позиций наблюдателя в ПСК$_К$ представляет собой полную производную по времени; первый член правой части сохраняет свой физический смысл, поскольку, как уже сказано выше, время течет одинаково во всех введенных системах отсчета. В двух оставшихся членах правой части (3.45) появляются коротационные члены, в которых теперь необходимо заменить тензор спина $\boldsymbol{\omega}$ на скорость ротации ПСК$_К$ относительно ПСК$_П$ $\boldsymbol{\omega}_1$. Данная замена вызвана тем, что при рассмотрении процесса с позиций наблюдателя в ПСК$_П$ вращение базисных векторов ПСК$_К$ необходимо рассматривать также с позиций этого же наблюдателя, т.е. относительно базиса $\bar{\mathbf{k}}^i$. Таким образом, получим:

$$\dot{\tilde{e}}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}(\tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j) - \boldsymbol{\omega}_1 \cdot \tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j + \tilde{e}_{ij}\tilde{\mathbf{k}}^i\tilde{\mathbf{k}}^j \cdot \boldsymbol{\omega}_1. \tag{3.49}$$

С учетом вышеприведенного можно определить изменение меры **E** в базисе ПСК$_П$ следующим соотношением:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathrm{t}) - \mathbf{E}(0) &= \left(\bar{E}_{ij}(\mathrm{t}) - \bar{E}_{ij}(0)\right)\bar{\mathbf{k}}_i\bar{\mathbf{k}}_j = \\ &= \left\langle \mathbf{e}^{(n)}(\mathrm{t}) - \mathbf{e}^{(n)}(0) \right\rangle + \left\langle \int_0^{\mathrm{t}} \left(\mathbf{e}^{(n)} \cdot \boldsymbol{\omega}_1^{(n)} - \boldsymbol{\omega}_1^{(n)} \cdot \mathbf{e}^{(n)}\right) \mathrm{dt} \right\rangle. \end{aligned} \tag{3.50}$$

При интегрировании лучше работать в базисе ПСК$_П$, поскольку именно в этой системе определяется физический смысл меры деформации макроуровня [76]. В то же время, учитывая, что исходное рассмотрение осуществляется в терминах ЛСК, для определения тензора спина $\boldsymbol{\omega}_1$ следует использовать соотношение(3.48).

Ясный физический смысл в (3.50), который следует из приведенного выше соотношения (3.39) для меры деформации кристаллитов, имеет только первый член правой части. Интегрирование второго члена в аналитической форме не представляется возможным ввиду отсутствия аналитической зависимости спинов кристаллитов относительно ПСК$_П$, вращение которой также неизвестно и определяется непосредственно в ходе расчета, вследствие чего была произведена численная оценка вклада второго члена в конкретных примерах [76]. В цитируемой работе показано, что для всех рассмотренных типов нагружения (осадка, сдвиг, два сдвига в различных плоскостях, деформирование по окружности в пространстве $\mathfrak{I}^{(9)}$) значение неголономной меры деформирования с погрешностью не более 2% равно среднему значению сумм по всем системам скольжения произведений накопленных сдвигов на базисные диады всех кристаллитов, составляющих представительный макрообъем.

Следует отметить, что, вообще говоря, используемые выше тензоры **E**, **e** представляют собой меры деформации, в качестве тензоров деформаций следует использовать разности **E**–**E**(0), **e** – **e**(0). По существу, **E**(0) и **e**(0) представляют собой градиенты соответствующих радиусов – векторов в отсчетных конфигурациях, т.е. $\mathbf{E}(0) = \mathbf{e}(0) = \mathbf{I}$, где $\mathbf{I}$ – единичный тензор второго ранга. В дальнейшем под $\mathbf{E}$ и $\mathbf{e}$ будут пониматься именно тензоры деформации.

3.5. Алгоритм для описания нагружения представительного объема в случае больших градиентов перемещений

Рассмотрим алгоритм, позволяющий реализовывать в численных экспериментах предписанное жесткое нагружение представительного объема поликристаллического агрегата по произвольной траектории нагружения в девятимерном пространстве деформаций (раздел 1.2). Особое внимание уделяется алгоритму реализации в терминах ЛСК траектории деформирования, заданной для материала в связанной с ним подвижной системе координат. Как было отмечено выше, необходимость введения данной системы координат на каждом масштабном уровне обусловлена, во-первых, тем, что образ процесса должен описывать свойства исследуемого материала и поэтому должен рассматриваться в системе координат, связанной с деформируемым материалом; во-вторых, требованием выполнения принципа независимости образа процесса нагружения от наложенного жесткого движения [69, 70]. В цитируемых работах показано, что в случае принятия гипотез Γ_W, Γ_Ω образ процесса нагружения является независимым от наложенного жесткого движения. При использовании гипотезы Γ_0, т.е. при отказе от разложения движения на квазитвердое и деформационное, образ процесса является зависимым от наложенного жесткого движения [71]. Это связано с тем, что значения компонент мер напряжений и деформаций, фиксируемых неподвижным наблюдателем в ЛСК, зависят от квазитвердого движения представительного объема, которое в общем случае является произвольным.

При установлении ПСК, связанной с материалом, следует учитывать, что образ процесса нагружения должен строиться по компонентам мер напряжений и деформаций, имеющих ясный физический смысл в данной подвижной системе координат. В настоящей работе построение ОПН осуществлено по компонентам тензора напряжений Коши макроуровня $\mathbf{\Sigma}$, имеющего прозрачный физический смысл в актуальной конфигурации, и по компонентам меры деформаций $\mathbf{E}$, смысл которой показан в разделе 3.4. Связь компонент векторов напряжений и деформаций с компонентами указанных тензоров дана в разделе 1.2.

Следует отметить, что хотя образ процесса нагружения следует определять в терминах подвижной системы координат, связанной с материальным объемом (того или иного уровня), реализация нагружения в натурном эксперименте осуществляется приводом машины сложного нагружения, связанной с условно неподвижным пространством. Иначе говоря, для реализации предписанного процесса нагружения необходимо определить параметры нагружения в терминах условно неподвижной (лабораторной) системы координат.

При этом предписанная траектория нагружения (деформирования) задается в терминах введенной подвижной системы координат, с которой считается связанным квазитвердое движение (определяемое осреднением спина мезоуровня$(2.57)_1$) собственно материала (представительного объема соответствующего уровня). Напомним, что нагружение представительного макрообъема осуществляется по траектории, заданной в $ПСК_П$.

Поскольку в реальном натурном эксперименте имеется возможность управления кинематическим нагружением исключительно в терминах лабораторной системы координат, возникает нетривиальная задача определения кинематического воздействия в этой системе координат (по известной траектории в подвижной системе координат), которое должно быть реализовано управляющим устройством машины сложного нагружения. Следует отметить, что в случае такого определения кинематического нагружения может возникнуть неразрешимая на сегодняшний день проблема реализуемости получаемой программы нагружения. Действительно, существующие машины способны осуществлять нагружение в пространстве деформаций (напряжений) с размерностью не выше 3 (раздел 1.3), а получаемые из двумерных или трехмерных траекторий деформаций в подвижной системе координат могут иметь весьма сложный вид и размерность выше трех при переходе к траектории в лабораторной системе. Следует отметить также, что при заданной траектории деформации в подвижной системе координат движение последней определяется в ходе решения задачи для представительного макрообъема, причем это движение зависит и от процесса деформирования, и от материала. При этом для реализации процесса нагружения в терминах лабораторной системы координат на приводы машины сложного нагружения необходимо передавать «полные» кинематические воздействия – как собственно деформационное движение относительно подвижной системы координат, так и переносное движение (вращение подвижной системы координат). Иначе говоря, к априори заданному деформационному движению (градиенту относительной скорости перемещения) необходимо добавлять квазитвердое движение (спин подвижной системы координат $\mathbf{\Omega}$). Заметим, что тензор спина $\mathbf{\Omega}$ в каждый момент деформирования зависит от состояния микроструктуры, скоростей сдвигов по системам скольжения, ориентации решеток, т.е. даже при полностью заданной траектории деформации в терминах подвижной системы координат тензор спина $\mathbf{\Omega}$ не может быть определен для всего диапазона деформирования, в связи с чем задание нагружения в лабораторной системе координат требуется осуществлять либо в скоростях, либо в приращениях на каждом шаге нагружения. При этом для одной и той же заданной траектории деформации в подвижной системе кинематические воздействия в лабораторной системе координат, необходимые для реализации предписанной траектории в подвижной системе, будут отличаться для поликристаллов, например, с разными типами кристаллической решетки.

В теории упругопластических процессов (раздел 1.1), сформулированной первоначально для геометрически линейной теории, нагружение материала считается полностью заданным, если определена траектория деформации или напряжения в терминах лабораторной системы координат. В настоящей работе рассматривается жесткое (кинематическое) нагружение, для задания которого необходимо знать траекторию деформирования для представительного макрообъема в девятимерном векторном евклидовом пространстве деформаций (раздел 1.2) (зависимость компонент вектора деформации от некоторого неубывающего параметра). Компоненты вектора деформации связаны с компонентами тензора полных деформаций $\mathbf{E}$ линейными соотношениями$(1.9)_1$, а компоненты вектора касательной к траектории – с компонентами тензора скорости деформаций; следовательно, траектория деформаций может быть определена, если в каждый момент времени известны компоненты тензора скорости деформаций $\mathbf{E}$ в некоторой системе координат. Компоненты вектора напряжений $\mathbf{S}$ связаны с компонентами тензора напряжений $\mathbf{\Sigma}$ соотношением $(1.9)_2$.

На рис. 3.1 схематично указаны относительные ориентации лабораторной и подвижных систем координат ПСК$_\text{П}$ и ПСК$_\text{К}$. Отметим, что здесь, как и ранее, чертой сверху будут обозначаться величины (векторы базиса и компоненты тензоров), определенные в подвижной системе координат, характеризующей квазитвердое движение на макроуровне; символом "$\tilde{}$" сверху – величины в системе координат, связанной с решеткой (мезоуровень); без дополнительных символов – величины, определенные в лабораторной системе координат. Отметим, что понятие «тензор, определенный в той или иной системе координат» относится к его физическому смыслу (т.е. в данной системе компоненты тензора имеют вполне определенный физический смысл); при этом тензор как объект, не зависящий от выбора системы координат, может быть представлен компонентами в любом другом базисе, однако при этом его компоненты могут утратить ясный физический смысл. Таким образом, полагаем, что траектория нагружения, определяемая зависимостью $\mathbf{E}(t) = \bar{\mathrm{E}}_{ij}(t)\,\bar{\mathbf{e}}_i\,\bar{\mathbf{e}}_j$, априори задана, тогда в каждый момент времени скорости изменения компонент $\dot{\bar{\mathrm{E}}}_{ij}(t)$, приписанные к вращающемуся базису подвижной системы, будут определять (согласно (3.40)) градиент относительной скорости перемещений $\mathbf{Z} = \bar{\nabla}\mathbf{V}_\text{r}^\text{T}$.В каждый момент времени ориентация ПСК$_\text{П}$ относительно лабораторной СК определяется ортогональным тензором $\mathbf{O} = \mathbf{e}_i\,\bar{\mathbf{e}}_i$, $\mathbf{O}\big|_{t=0} = \mathbf{I}$, где $\mathbf{e}_i$ – базис лабораторной, $\bar{\mathbf{e}}_i$ – базис подвижной системы координат макроуровня. Ориентация ПСК$_\text{К}$ (с базисом $\tilde{\mathbf{e}}_i$) каждого кристаллита относительно лабораторной СК определяется ортогональным тензором $\mathbf{o} = \mathbf{e}_i\tilde{\mathbf{e}}_i$; все используемые системы координат – декартовы ортогональные.

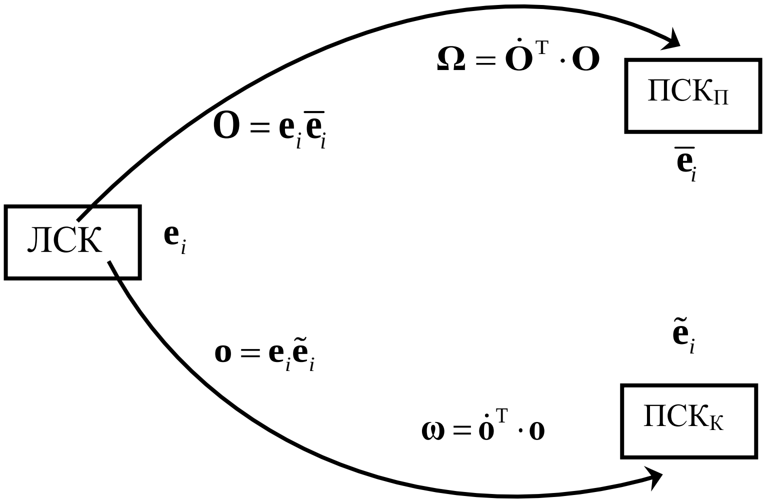

Рис. 3.1. Схематичное изображение взаимных ориентаций лабораторной (ЛСК) и подвижных СК макро- (ПСК$_{\text{П}}$) и мезоуровня (ПСК$_{\text{К}}$) и связей между ними

Приведем соотношения для преобразования базисных векторов введенных систем координат:

$$\begin{aligned} &\mathbf{o} = \mathbf{e}_i \tilde{\mathbf{e}}_i,\ \tilde{\mathbf{e}}_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{o} = \mathbf{o}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i,\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i \tilde{\mathbf{e}}_i,\ \boldsymbol{\omega} = \dot{\mathbf{o}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{o}, \\ &\mathbf{O} = \mathbf{e}_i \bar{\mathbf{e}}_i,\ \bar{\mathbf{e}}_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{O} = \mathbf{O}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{e}_i,\ \mathbf{\Omega} = \dot{\bar{\mathbf{e}}}_i \bar{\mathbf{e}}_i,\ \mathbf{\Omega} = \dot{\mathbf{O}}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{O}, \end{aligned} \tag{3.51}$$

Компоненты ортогональных тензоров:

$$\begin{aligned} &\tilde{\mathrm{o}}_{mn} = \mathrm{o}_{mn} = \tilde{\mathbf{e}}_m \cdot \ \mathbf{e}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \ \cdot \tilde{\mathbf{e}}_n = \mathbf{e}_m \cdot \ \mathbf{e}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \ \cdot \mathbf{e}_n = \tilde{\mathbf{e}}_m \cdot \mathbf{e}_n, \\ &\bar{\mathrm{O}}_{mn} = \mathrm{O}_{mn} = \bar{\mathbf{e}}_m \cdot \ \mathbf{e}_i \bar{\mathbf{e}}_i \ \cdot \bar{\mathbf{e}}_n = \mathbf{e}_m \cdot \ \mathbf{e}_i \bar{\mathbf{e}}_i \ \cdot \mathbf{e}_n = \bar{\mathbf{e}}_m \cdot \mathbf{e}_n. \end{aligned} \tag{3.52}$$

Компоненты тензора спина $\mathbf{\Omega}$ в базисе подвижной системы координат:

$$\bar{\Omega}_{ij} = \bar{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{\Omega} \cdot \bar{\mathbf{e}}_j = \bar{\mathbf{e}}_i \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_m \bar{\mathbf{e}}_m \cdot \bar{\mathbf{e}}_j = \bar{\mathbf{e}}_i \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_j, \tag{3.53}$$

в базисе ЛСК:

$$\begin{aligned} &\Omega_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_m \bar{\mathbf{e}}_m \cdot \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_i \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_m \mathrm{O}_{mj} = \\ &= \mathbf{O} \cdot \bar{\mathbf{e}}_i \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_m \mathrm{O}_{mj} = \mathrm{O}_{pq} \bar{\mathbf{e}}_p \bar{\mathbf{e}}_q \cdot \bar{\mathbf{e}}_i \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_m \mathrm{O}_{mj} = \\ &= \mathrm{O}_{pi} \bar{\mathbf{e}}_p \cdot \dot{\bar{\mathbf{e}}}_m \mathrm{O}_{mj} = \mathrm{O}_{pi} \bar{\Omega}_{pm} \mathrm{O}_{mj}. \end{aligned} \tag{3.54}$$

Аналогично для тензора спина ПСК$_{\text{К}}$:

$$\begin{aligned} &\tilde{\omega}_{ij} = \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_j = \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \dot{\tilde{\mathbf{e}}}_i \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \tilde{\mathbf{e}}_j = \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \dot{\tilde{\mathbf{e}}}_j, \\ &\omega_{ij} = \mathbf{e}_i \cdot \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{e}_j = \mathrm{o}_{pi} \tilde{\omega}_{pm} \mathrm{o}_{mj}. \end{aligned} \tag{3.55}$$

Для описания движения сплошной среды в скоростях используется отсчетный лагранжев подход, при котором кинематика движения сплошной среды определяется в терминах отсчетной лагранжевой СК $O\xi^1\xi^2\xi^3$. При этом вводится единая для всех конфигураций декартова ортогональная система координат $Ox^1x^2x^3$ (в случае нагружения в ЛСК) или $O\overline{x}^1\overline{x}^2\overline{x}^3$ (в случае нагружения в ПСК), компоненты радиус-векторов в отсчетной и текущей конфигурации обозначаются как a_i и x_i.

В случае описания нагружения в терминах ЛСК считается заданной зависимость компонент градиента полных скоростей перемещений от некоторого неубывающего параметра $\mathbf{L}(t)$ в ЛСК($Ox^1x^2x^3$). Если кинематика процесса задана в конечных величинах, например, зависимостью $\mathbf{F}(t)$, связывающего значения компонент a_i и x_i радиус-вектора частицы в отсчетной и текущей конфигурациях в единой системе $Ox^1x^2x^3$, то без труда можно перейти к зависимости $\mathbf{L}(t)$. В дальнейшем процесс нагружения считается заданным в ЛСК, если задана зависимость $\mathbf{L}(t)$, при этом в отсчетной конфигурации исследуемая область полагается находящейся в естественной конфигурации.

Процесс нагружения считается заданным в ПСК, если определена зависимость градиента относительных скоростей перемещений $\mathbf{Z}(t)$ в терминах ПСК $O\overline{x}^1\overline{x}^2\overline{x}^3$, которая с позиций наблюдателя в ЛСК является подвижной. Кинематика в ПСК может быть определена также траекторией нагружения E(t), по которой дифференцированием можно перейти к зависимости Z(t) (3.40).

Ввиду того, что в реальных процессах (экспериментах) кинематика задается исключительно в терминах ЛСК, необходимо по заданному в ПСК $\mathbf{Z}(t)$ определять в каждый момент времени значение $\mathbf{L}(t)$. В связи с этим более подробно обсудим алгоритм определения квазитвердого движения ПСК при определении движения в терминах ПСК. Стоит отметить, что в общем случае задача определения движения относительно условно неподвижного наблюдателя (в ЛСК) при известном движении только относительно подвижного наблюдателя (в ПСК) имеет множество мощности континуум решений – движение самой ПСК будет определено с точностью до произвольного вращения. Данный факт следует из известного из курса теоретической механики соотношения, связывающего полную, относительную $\mathbf{V}_{\mathrm{r}}$ и переносную $\mathbf{V}_e = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}$ скорости:

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_{\mathrm{r}} + \mathbf{V}_e = \mathbf{V}_{\mathrm{r}} + \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}, \tag{3.56}$$

где $\mathbf{r}$ – радиус-вектор точки, жестко связанной с ПСК, с которой в данный момент времени совпадает движущаяся материальная частица, $\mathbf{\Omega}$– спин ПСК. Определяя градиент обеих частей(3.56), получим:

$$\begin{aligned} \nabla\mathbf{V} &= \nabla\mathbf{V}_{\mathrm{r}} + \nabla\ \ \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r}\ \ = \\ &= \nabla\mathbf{V}_{\mathrm{r}} + \nabla\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{r} + \nabla\mathbf{r} \cdot \mathbf{\Omega}^{\mathrm{T}} = \\ &= \nabla\mathbf{V}_{\mathrm{r}} + \nabla\mathbf{r} \cdot \mathbf{\Omega}^{\mathrm{T}} = \mathbf{Z}^{\mathrm{T}} - \mathbf{\Omega}, \end{aligned} \tag{3.57}$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{Z} + \mathbf{\Omega}. \tag{3.58}$$

Стоит отметить, что обычно транспонированный градиент скоростей перемещений $\mathbf{L}$ определен в терминах лагранжевой системы координат в актуальной конфигурации, однако для скоростей можно использовать текущий лагранжев подход при котором текущая лагранжева СК отождествляется с лабораторной СК.

Из соотношения (3.58) видно, что при заданном градиенте скорости перемещений относительно ПСК$\mathbf{Z}$ градиент полных скоростей перемещений (относительно наблюдателя в ЛСК) определяется с точностью до значения слагаемого $\mathbf{\Omega}$, связанного с квазитвердым движением ПСК. Однако из соотношений модели следует, что спин квазитвердого движения ПСК $\mathbf{\Omega}$ определяется как внутренней микроструктурой материала (скоростями сдвигов), так и градиентом полных скоростей перемещений. В связи с этим определение полного движения $\mathbf{L}$ по заданному $\mathbf{Z}$ возможно лишь с точностью до антисимметричного тензора, соответствующего привносимой в квазитвердое движение ПСК составляющей от $\mathbf{L}$. Покажем это более строго, основываясь на соотношения модели.

Из условий согласования и гипотезы Фойгта известно:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \\
&\mathbf{l} = \nabla \mathbf{v}^{\mathrm{T}} = \mathbf{L} = \nabla \mathbf{V}^{\mathrm{T}}, \\
&\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} = \langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \rangle - \delta \mathbf{Z}, \\
&\delta \mathbf{Z} = \boldsymbol{\Pi}^{-1} : \left(\left\langle \boldsymbol{\pi}' : \left(\mathbf{z}' - \mathbf{z}^{\mathrm{in}\prime} \right) \right\rangle - \langle \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\omega}' \rangle + \langle \boldsymbol{\omega}' \cdot \boldsymbol{\sigma}' \rangle \right).
\end{aligned} \tag{3.59}$$

При этом тензоры $\mathbf{z}^{\mathrm{in}}$ и $\mathbf{l}^{\mathrm{in}}$ обладают одним и тем же физическим смыслом, придаваемым им при разложении $\mathbf{z}$ и $\mathbf{l}$ на упругую и неупругую составляющие, – скорость сдвиговой деформации в кристаллите; поэтому:

$$\mathbf{l}^{\mathrm{in}} = \mathbf{z}^{\mathrm{in}}. \tag{3.60}$$

Для более компактной записи соотношения (3.23) введем оператор:

$$\mathbf{Spin}(\mathbf{A}) = \mathbf{Spin}(\mathrm{A}_{ij}\mathbf{k}_i\mathbf{k}_j) = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{A}_{21} & -\mathrm{A}_{31} \\ \mathrm{A}_{21} & 0 & -\mathrm{A}_{32} \\ \mathrm{A}_{31} & \mathrm{A}_{32} & 0 \end{pmatrix} \mathbf{k}_i\mathbf{k}_j. \tag{3.61}$$

Данный оператор отображает множество всех тензоров второго ранга на множество антисимметричных тензоров того же ранга. Стоит отдельно отметить свойство линейности данного оператора: **Spin(a+b)=Spin(a)+Spin(b)**, используемое далее. Принимая во внимание вышесказанное, из (3.23) и $(3.59)_1$ получим:

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\omega} = \mathbf{Spin}(\mathbf{l}^{\mathrm{e}}) = \mathbf{Spin}(\mathbf{l} - \mathbf{l}^{\mathrm{in}}) = \mathbf{Spin}(\mathbf{L} - \mathbf{z}^{\mathrm{in}}) = \mathbf{Spin}(\mathbf{L}) - \mathbf{Spin}(\mathbf{z}^{\mathrm{in}}), \\
&\boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle = \mathbf{Spin}(\mathbf{L}) - \mathbf{Spin}\left(\langle \mathbf{z}^{\mathrm{in}} \rangle\right) = \mathbf{Spin}(\mathbf{L}) - \mathbf{Spin}(\mathbf{Z}^{\mathrm{in}} + \delta\mathbf{Z}) = \\
&= \mathbf{Spin}(\mathbf{L}) - \mathbf{Spin}(\mathbf{Z}^{\mathrm{in}}) - \mathbf{Spin}(\delta\mathbf{Z}).
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Подставляя полученное выражение для $\boldsymbol{\Omega}$ в (3.58), имеем:

$$\mathbf{L} = \mathbf{Z} + \mathbf{Spin}(\mathbf{L}) - \mathbf{Spin}(\mathbf{Z}^{\mathrm{in}}) - \mathbf{Spin}(\delta\mathbf{Z}), \tag{3.63}$$

откуда видно, что тензор $\mathbf{L}$ определяется по $\mathbf{Z}$ с точностью до антисимметричного тензора. Другими словами при известном только деформационном движении среды относительно подвижного наблюдателя полное движение определяется с точностью до произвольного поворота. При этом все движения среды в терминах наблюдателя в ЛСК, отличающиеся от $\mathbf{L}$ на антисимметричный тензор представляют собой эквивалентные движения, т.е. приводящие к одному и тому же деформационному движению с позиций наблюдателя в ПСК.

Таким образом, в рамках настоящей двухуровневой модели можно определить «мгновенную» кинематику сплошной среды с позиций неподвижного наблюдателя только с точностью до некоторого антисимметричного тензора, если известно только деформационное движение среды относительно подвижного наблюдателя.

Применительно к поставленной задаче определения спина ПСК $\mathbf{\Omega}$ при заданном в ПСК процессе нагружения $\mathbf{Z}$ достаточно найти только один процесс нагружения в ЛСК из множества эквивалентных. В связи с этим предлагается следующий способ определения полной кинематики среды $\mathbf{L}$ (в терминах ЛСК) по заданному $\mathbf{Z}$. Мгновенное нагружение в ЛСК будет передаваться из ПСК (от наблюдателя в ПСК) в предположении, что ПСК неподвижна:

$$\mathbf{L}(t) = \mathbf{Z}(t) = \mathrm{O}_{mi}\overline{\mathrm{Z}}_{mn}(t)\,\mathrm{O}_{nj}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j. \tag{3.64}$$

Необходимо отметить, что относительно наблюдателя в ЛСК наблюдатель в ПСК будет испытывать квазитвердое движение, в связи с чем в каждый момент времени ПСК относительно ЛСК будет изменять ориентацию $\mathbf{O}$ со скоростью спина ПСК $\mathbf{\Omega}$. Таким образом, мгновенное движение среды с позиций данных наблюдателей (в компонентах их СК) будет различным и определяться соотношениями:

$$\begin{aligned} \mathrm{L}_{mn} &= \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{e}_j, \\ \overline{\mathrm{Z}}_{mn} &= \overline{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{Z} \cdot \overline{\mathbf{e}}_j, \\ \mathrm{L}_{ij} &= \mathrm{O}_{mi}\overline{\mathrm{Z}}_{mn}\mathrm{O}_{nj}, \end{aligned} \tag{3.65}$$

где чертой сверху обозначены величины, определенные в терминах ПСК, без черты – в ЛСК.

Для проверки корректности представленного способа передачи кинематики из ПСК в ЛСК (3.64) предлагается следующая процедура тестирования. Допустим, процесс нагружения в ЛСК задан зависимостью градиента полных скоростей перемещений:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}\ \ t\ . \tag{3.66}$$

1. На первом этапе необходимо для заданного в ЛСК процесса найти зависимость градиента относительных скоростей перемещений $\mathbf{Z}$(t), определяющих процесс нагружения в ПСК.
2. На втором этапе необходимо произвести нагружение в терминах ПСК по найденному на первом этапе $\mathbf{Z}$(t). По процессу нагружения в ПСК определяется $\mathbf{L}$'(t) в ЛСК, используя соотношение (3.64).
3. Третий этап является верификацией полученного на втором этапе процесса нагружения в ЛСК. Для проверки производится нагружение в терминах ЛСК по $\mathbf{L}$'(t), при этом в терминах ПСК реализуется нагружение, определяемое зависимостью $\mathbf{Z}$'(t). Если $\mathbf{Z}$(t) и $\mathbf{Z}$'(t) в каждый момент имеют отличие не более допустимой погрешности, то процессы $\mathbf{L}$ (t) и $\mathbf{L}$'(t) являются эквивалентными.

Действительно, численная проверка показала, что реализация трех представленных этапов нагружения приводит к достаточно близким траекториям $\mathbf{Z}$(t) и $\mathbf{Z}$'(t) в ПСК при различных, но эквивалентных, траекториях в ЛСК $\mathbf{L}$ (t) и $\mathbf{L}$'(t). Если по $\mathbf{Z}$(t) и $\mathbf{Z}$'(t) построить траектории $\mathbf{E}$(t) и $\mathbf{E}$'(t), то их максимальное отклонение друг от друга по норме $\|\mathbf{A}\| = \sqrt{\mathbf{A} : \mathbf{A}^{\mathrm{T}}}$ составляет не более 0,06% для процесса простого сдвига до 50% полных деформаций. Также была проведена проверка на процессе двух последовательных сдвигов в ЛСК до 25% каждый для поликристаллов с ГЦК и ОЦК решетками; полученные отклонения не превышали 0.1%. Аналогичный результат был получен при нагружении по окружности (полные деформации достигают 95%). Относительное отклонение касательных к траекториям $\mathbf{E}$(t) и $\mathbf{E}$'(t), определяемое соотношением:

$$\frac{\sqrt{\ \mathbf{Z} - \mathbf{Z}'\ :\ \mathbf{Z} - \mathbf{Z}'\ ^{\mathrm{T}}}}{\sqrt{\mathbf{Z} : \mathbf{Z}^{\mathrm{T}}}}, \tag{3.67}$$

составило не более 0.5% на протяжении всего процесса для всех представленных процессов.

Приведенные результаты проверки свидетельствуют о корректности предлагаемого алгоритма восстановления траектории деформации в терминах ЛСК по траектории, заданной в ПСК, по крайней мере – для траекторий, имеющими сходную геометрию с используемыми для проверки траекториями. Для существенно отличающихся по геометрии траекторий представляется целесообразным проводить дополнительную проверку.

Таким образом, реализация нагружения представительного макрообъема в терминах лабораторной системы (на испытательной машине) по предписанной в подвижной системе координат траектории деформации осуществляется следующим образом. В каждый момент (в численной реализации – на каждом шаге интегрирования) согласно расширенной гипотезе Фойгта необходимо передать воздействие **Z**, заданное в подвижной системе, в лабораторную (**L**). Далее по определенному в лабораторной системе координат кинематическому воздействию вычисляется отклик поликристаллического агрегата и спин подвижной системы координат.

Глава 4. Анализ результатов численных экспериментов по сложному нагружению представительного объема поликристаллического материала

В настоящей главе представлен алгоритм численной реализации (раздел 4.1), описание и анализ результатов численных экспериментов по нагружению представительного объема поликристаллического материала с ОЦК решеткой по траекториям различной степени сложности. В разделе 4.2 приведены постановка и решение задачи идентификации параметров модели для материала сталь 45 (Ст45), имеющего ОЦК решетку. В разделе 4.3 представлены результаты расчета при нагружении представительного объема кристаллитов Ст45 по траекториям различной степени сложности в случае малых деформаций, и сделана попытка объяснения известных эффектов сложного нагружения, связанных с запаздыванием векторных и скалярных свойств. В разделе 4.4 представлены результаты численного моделирования процессов нагружения в случае больших градиентов перемещений. Произведена оценка точности выполнения частного постулата изотропии А.А. Ильюшина в случае принятия различных гипотез о разложении движения.

4.1. Алгоритм численной реализации конститутивной модели для описания нагружения представительного макрообъема

Поскольку задача является геометрически и физически нелинейной, для ее решения используется пошаговая процедура нагружения: весь временной интервал представляется совокупностью срезов по времени. Алгоритм решения задачи для шага по времени состоит из трех этапов: 1) решение задачи в скоростях (на момент начала шага), 2) интегрирование, 3) пересчет значений параметров (на конец шага по времени).

При наличии тензорных величин порядка выше нулевого численное решение возможно только в компонентах в некоторой системе координат. В связи с этим напомним обозначения, приведенные выше: A_{ij} – значения компонент произвольного тензора второго ранга **A** в базисе лабораторной системы координат, $\bar{\mathrm{A}}_{ij}$ –

значения его компонент в базисе ПСК$_{\text{П}}$, $\tilde{\mathrm{A}}_{ij}$ – в базисе ПСК$_{\text{К}}$; $\mathbf{O}$, O_{ij} – тензор ориентации ПСК$_{\text{П}}$ и его компоненты, $\mathbf{o}$, o_{im} – то же для ПСК$_{\text{К}}$; $\mathbf{z}$ – градиент относительных скоростей перемещений (в терминах ПСК$_{\text{К}}$); $\mathbf{L}$, $\mathbf{Z}$ – градиенты полных скоростей перемещений в лабораторной и относительных скоростей перемещений в подвижной системе координат; $\mathbf{\Omega}$ – тензор спина подвижной системы координат ПСК$_{\text{П}}$; тензор $\mathbf{L}^{(k)}$ – градиент скорости полных перемещений, $\mathbf{Z}^{(k)}$ – градиент скорости относительных перемещений на шаге интегрирования k.

Стоит обратить внимание, что при численном решении подобного рода задач всегда возникает проблема первого шага, связанная, например, с возможным получением сверхбольших напряжений, что приводит к погрешностям или останову счета. Для решения данной проблемы в рассматриваемой задаче первый шаг принимается значительно меньшим по сравнению с последующими; кроме этого, спин подвижной системы относительно лабораторной на первой итерации каждого шага примем тривиальным $\mathbf{\Omega}^{(0)} = \mathbf{0}$.

Ниже представлен алгоритм численной реализации нагружения как в терминах ЛСК, так и в терминах ПСК$_{\text{П}}$. Верхним индексом обозначен шаг интегрирования.

1. Этап 0 – определение градиента полных скоростей перемещений в терминах ЛСК.
   a. Если процесс задан в ЛСК, то $\mathbf{L}^{(k)}$ определяется непосредственно:

$$\begin{aligned} &\mathrm{L}_{ij}^{k}\,\mathbf{e}_i\mathbf{e}_j = \mathbf{L}^{k} = \mathbf{L}\ \ \mathrm{t}^{k}\ \ , \\ &\mathrm{L}_{ij}^{k} = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{L}^{k} \cdot \mathbf{e}_j. \end{aligned} \tag{4.1}$$

   b. Если процесс задан в терминах ПСК$_{\text{П}}$ градиентом относительных скоростей перемещений $\mathbf{Z}(\mathrm{t})$, тогда $\mathbf{L}^{(k)}$ устанавливается согласно следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} &\mathbf{L}^{k} = \mathbf{Z}^{k} = \mathbf{Z}\ \ \mathrm{t}^{k}\ \ , \\ &\overline{\mathrm{Z}}_{mn}^{(k)} = \overline{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{Z}^{k} \cdot \overline{\mathbf{e}}_j, \\ &\mathrm{L}_{ij}^{(k)} = \mathrm{O}_{mi}^{(k-1)}\overline{\mathrm{Z}}_{mn}^{(k)}\mathrm{O}_{nj}^{(k-1)}, \end{aligned} \tag{4.2}$$

при этом, как показано выше, получаемая в ЛСК траектория будет соответствовать одной из эквивалентных(3.64).

2. Этап 1 – решение в скоростях:
   a. цикл по элементам мезоуровня (кристаллитам):
      i. определение компонент градиента относительных скоростей перемещений **z** в терминах ПСК$_К$:

$$\begin{aligned} &\mathbf{z}^{k} = \mathbf{L}^{k} - \boldsymbol{\omega}^{k-1}, \\ &\tilde{z}_{ij}^{(k)} = o_{im}^{(k-1)} \left(L_{mn}^{(k)} - \omega_{mn}^{(k-1)} \right) o_{jn}^{(k-1)}; \end{aligned} \tag{4.3}$$

      ii. вычисление отклика элементов мезоуровня (для каждого кристаллита): скоростей сдвигов $\dot{\gamma}^{k}$ (2.30) и скорости изменения неупругих деформаций $\mathbf{z}^{\mathrm{in}(k)}$, скорости изменения критических сдвиговых напряжений $\dot{\tau}_c^{k}$ (упрочнение) (2.32), скорости изменения напряжений $\dot{\boldsymbol{\sigma}}^{k}$ (2.53), мгновенной угловой скорости вращения $\boldsymbol{\omega}^{(k)}$ (в зависимости от принятой модели ротации). При этом на рассматриваемом временном срезе известными являются: градиент скорости относительных перемещений в ПСК$_К$ $\mathbf{z}^{k}$ (4.3), напряжения $\boldsymbol{\sigma}^{(k-1)}$, накопленные сдвиги $\boldsymbol{\gamma}^{(k-1)}$, критические сдвиговые напряжения τ_c^{k-1} (для каждой СС) и ориентационный тензор $\mathbf{o}^{(k-1)}$, определенные на конец предыдущего шага;
   b. вычисление тензора спина $\boldsymbol{\Omega}^{(k)}$ подвижной системы представительного макрообъема в зависимости от принимаемой гипотезы о разложении движения на макроуровне;
   c. вычисление меры скорости неупругих деформаций макроуровня (2.66) или (3.29) в зависимости от принимаемой гипотезы;
   d. вычисление скорости приращения напряжений представительного макрообъема (2.54).
3. Этап 2 – интегрирование:

a. цикл по элементам мезоуровня: вычисление значений внутренних переменных для элементов мезоуровня на конец шага: сдвигов, критических сдвиговых напряжений и тензора напряжений:

$$
\begin{aligned}
&\gamma^{k} = \gamma^{k-1} + \dot{\gamma}^{k}\,\Delta t,\\
&\tau^{k} = \tau^{k-1} + \dot{\tau}^{k}\,\Delta t,\\
&\tilde{\sigma}_{ij}^{\;k} = \tilde{\sigma}_{ij}^{\;k-1} + \dot{\tilde{\sigma}}_{ij}^{\;k}\,\Delta t,\\
&\tilde{\sigma}_{ij} = \tilde{\mathbf{e}}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \tilde{\mathbf{e}}_j,
\end{aligned}
\tag{4.4}
$$

при этом для векторных и тензорных характеристик производится интегрирование в компонентах ПСК$_К$, в предположении, что они определены в базисе $\tilde{\mathbf{e}}_i$ ПСК$_К$.

b. определение макронапряжений на конец шага:

$$
\begin{aligned}
&\overline{\Sigma}_{ij}^{\;k} = \overline{\Sigma}_{ij}^{\;k-1} + \overline{\Sigma}_{ij}^{\;\mathrm{CR}\;k}\,\Delta t,\\
&\overline{\Sigma}_{ij}^{\;k} = \overline{\mathbf{e}}_i \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{k} \cdot \overline{\mathbf{e}}_j,\\
&\overline{\Sigma}_{ij}^{\;\mathrm{CR}\;k} = \overline{\mathbf{e}}_i \cdot \boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{CR}\;k} \cdot \overline{\mathbf{e}}_j.
\end{aligned}
\tag{4.5}
$$

4. Этап 3 – переопределение ориентаций:

a. вычисление ориентаций ПСК$_К$ элементов мезоуровня на конец шага интегрирования:

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{o}^{k} = \Delta\mathbf{o}^{k} \cdot \mathbf{o}^{k-1},\\
&\boldsymbol{\varphi}^{k} = \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\omega}^{k} - \text{ ассоциированный вектор угловой скорости},\\
&\varphi^{k} = \sqrt{\boldsymbol{\varphi}^{k} \cdot \boldsymbol{\varphi}^{k}} - \text{угловая скорость},\\
&\boldsymbol{\delta}^{k} = \boldsymbol{\varphi}^{k} / \varphi^{k} - \text{ось мгновенного поворота},\\
&\Delta\mathbf{o}^{k} = \cos\varphi^{k}\Delta t + 1\;\boldsymbol{\delta}^{k}\boldsymbol{\delta}^{k} + \cos\varphi^{k}\Delta t\;\mathbf{I} + \sin\varphi^{k}\Delta t\;\boldsymbol{\delta}^{k} \times \mathbf{I},\\
&\mathbf{I} - \text{единичный тензор.}
\end{aligned}
\tag{4.6}
$$

где $\boldsymbol{\epsilon}$ – тензор Леви-Чивиты;

b. переопределение ориентации подвижной системы координат макроуровня на конец шага:

$$\mathbf{O}^{k} = \Delta\mathbf{O}^{k} \cdot \mathbf{O}^{k-1},$$

$\boldsymbol{\Phi}^{k} = \boldsymbol{\epsilon} : \boldsymbol{\Omega}^{k}$ − ассоциированный вектор,

$\Phi^{k} = \sqrt{\boldsymbol{\Phi}^{k} \cdot \boldsymbol{\Phi}^{k}}$ – угловая скорость,

$\boldsymbol{\Delta}^{k} = \boldsymbol{\Phi}^{k} / \Phi^{k}$ – ось мгновенного поворота, (4.7)

$\Delta\mathbf{O}^{k}$: поворот на угол $\varphi^{k}\Delta t$ вокруг оси $\boldsymbol{\Delta}^{k}$;

$$\Delta\mathbf{O}^{k} = \left(\cos\left(\Phi^{k}\Delta t\right) + 1\right)\boldsymbol{\Delta}^{k}\boldsymbol{\Delta}^{k} + \cos\left(\Phi^{k}\Delta t\right)\mathbf{I} + \sin\left(\Phi^{k}\Delta t\right)\boldsymbol{\Delta}^{k} \times \mathbf{I},$$

$\mathbf{I}$ – единичный тензор.

c. определение компонент тензоров напряжений и деформаций макроуровня в ЛСК.

Представленный алгоритм позволяет численно реализовать нагружение выборки кристаллитов (с известной кристаллической решеткой и системами скольжения) по произвольным траекториям, определенным в терминах как ЛСК, так и ПСК.

4.2. Задача идентификации параметров модели

Настоящий параграф содержит постановку и результаты решения задачи идентификации и верификации параметров модели для материала сталь 45 (Ст45) с ОЦК решеткой. Идентификация производилась по известным экспериментальным данным (рис. 4.1[15, 16]), материал образцов для которых в исходном состоянии состоит в основном из кристаллитовα-Fe с незначительными перлитными включениями. Стоит обратить внимание, что в указанной экспериментальной работе в качестве скалярной меры деформаций использовалась отличная от меры, введенной в настоящей работе (1.10), при этом экспериментальные деформации для одноосного нагружения отличаются в 2 раза, для сдвига в $\sqrt{2}$ раза. Ввиду технической сложности разнесения на различные графики экспериментальных зависимостей для различных процессов при размещении на одном графике экспериментальных и полученных численно зависимостей последние масштабировались соответствующим образом. При решении задачи оптимизации факт различия масштабов также был принят во внимание.

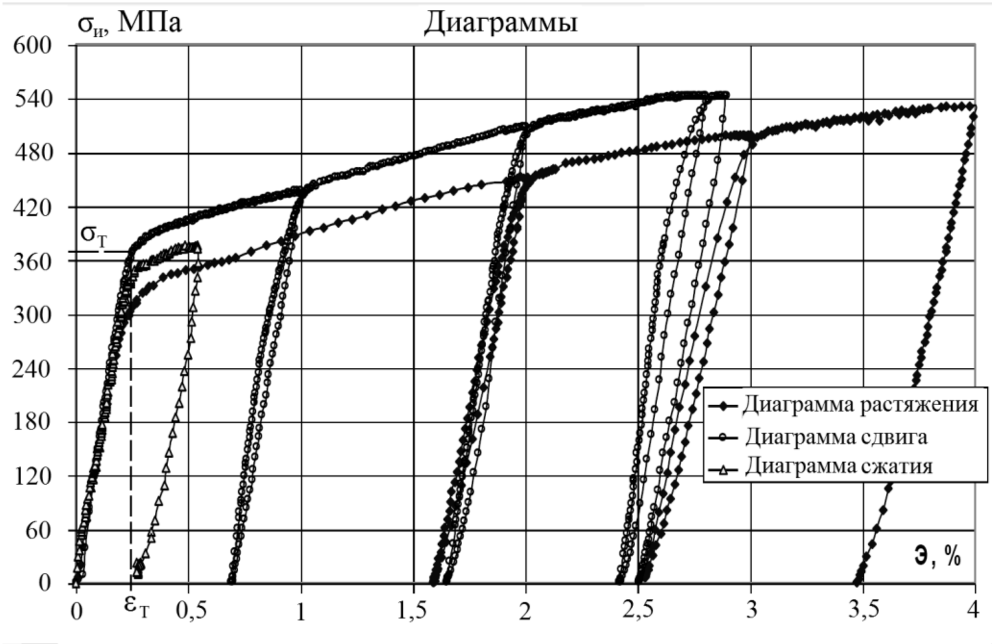

Рис. 4.1. Экспериментальные зависимости напряжений от деформаций для трубчатых образцов из Ст45

В качестве образца для проведения численных экспериментов использовался представительный макрообъем, состоящий из случайно ориентированных (по равномерному закону) кристаллитов стали Ст45 с ОЦК решеткой общим числом N = 1728, имеющих три семейства систем скольжения:

$$
\begin{aligned}
&110\ \langle 111 \rangle - \text{I семейство},\\
&112\ \langle 111 \rangle - \text{II семейство},\\
&123\ \langle 111 \rangle - \text{III семейство},
\end{aligned}
\tag{4.8}
$$

при этом на первое приходится 12 реальных систем скольжения (24 модельных), 12 на второе (24 модельных) и 24 (48) на третье; всего 96 модельных СС. Стоит обратить внимание, что критические касательные напряжения для различных семейств имеют различные значения, при этом известно, что для указанного материала наименьшие значения соответствуют первому семейству СС. Следуя [30], отношения начальных критических напряжений в СС семейства II и III к начальным критическим напряжениям в СС Iможно оценить с помощью напряжения Пайерлса-Набарро. Проведенные оценки приводят к следующим результатам:

$$k_{\text{II}} = 4.7,\ k_{\text{III}} = 24.7. \qquad (4.9)$$

При постановке задачи идентификации ряд параметров считался известным: значения упругих модулей, скорость сдвига при достижении критического напряжения сдвига, параметр скоростной чувствительности в соотношении для определения скоростей сдвигов (2.30) и отношение модулей деформационного и латентного упрочнения β:

$$\begin{aligned} &\text{п}_{iiii} = 220\ \text{ГПа},\ \text{п}_{iijj} = 166\ \text{ГПа},\ \text{п}_{ijji} = \text{п}_{ijij} = 87\ \text{ГПа} = \text{G}, \\ &\dot{\gamma}_0 = 10^{-6},\ \text{m} = 96,\ \beta = 1.4. \end{aligned} \qquad (4.10)$$

Неизвестными считались параметры, входящие в закон упрочнения (2.32): диагональные элементы матрицы упрочнения ξ_0, степенные параметры ψ, δ, а также начальные критические напряжения сдвига в СС I семейства $\tau_{c0}^{\text{I}(k)}$, при этом, учитывая (4.9), начальные критические напряжения в СС других семейств пропорциональны $\tau_{c0}^{\text{I}(k)}$:

$$\tau_{c0}^{\text{II}(k)} = k_{\text{II}}\tau_{c0}^{\text{I}(k)},\ \tau_{c0}^{\text{III}(k)} = k_{\text{III}}\tau_{c0}^{\text{I}(k)}. \qquad (4.11)$$

Таким образом, задача идентификации сводится к поиску параметров: ξ_0, ψ, δ, $\tau_{c0}^{\text{I}(k)}$, при этом решение задачи производилось в два этапа. На первом этапе осуществлялся поиск значения начального критического касательного напряжения $\tau_{c0}^{\text{I}(k)}$ по наилучшему соответствию перехода кривой напряжение - деформация из упругой в упругопластическую область. На графике экспериментальной зависимости интенсивности напряжений от интенсивности деформаций для нагружения сдвигом данный переход отчетливо виден (соответствующая интенсивность деформаций обозначена как ε_{T} (рис. 4.1)): начало области перехода из упругости в упругопластичность соответствует точке ε_{T} = 0.17% (на графике 0.24%, что в $\sqrt{2}$ раза больше значения интенсивности), σ_{T} = 371 МПа. В упругой области зависимость напряжений от деформаций имеет линейный характер, поэтому на первом этапе не было необходимости постановки оптимизационной задачи – задача свелась к поиску $\tau_{c0}^{\text{I}(k)}$, соответствующего активации хотя бы одной

СС скольжения при полной деформации $\varepsilon_T = 0.24\%$. Поиск был реализован методом дихотомии на отрезке $[0, \sigma_T]$ для нагружения растяжением; решение было найдено с точность до 1 МПа и дало значение $\tau_{c0}^{\mathrm{I}(k)} = 140$ МПа.

На втором этапе производился поиск оптимального вектора параметров $\mathbf{x} = (\xi_0, \psi, \delta)$, обеспечивающего наименьшее максимальное отклонение значений интенсивностей напряжений в соответствующих точках (4.14) при фиксированном векторе известных параметров **u**, включающего в себя параметры (4.10) и найденное на первом этапе $\tau_{c0}^{\mathrm{I}(k)}$:

$$\mathbf{u} = \left(\pi_{iiii}, \pi_{iijj}, \pi_{ijji}, \dot{\gamma}_0, \mathrm{m}, \beta, k_{\mathrm{II}}, k_{\mathrm{III}}, \tau_{c0}^{\mathrm{I}(k)}\right). \qquad (4.12)$$

Была поставлена задача условной оптимизации, при этом область допустимых значений **X** параметров **x** принималась следующей:

$$\mathbf{X} : \xi_0 \in \left[0, 10^{-2}\right], \psi \in (0, 2), \delta \in (0, 2). \qquad (4.13)$$

Критерий оптимизации:

$$\begin{aligned} &F\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \Sigma_*^{\varepsilon_i}\right) = \frac{1}{\sigma_T} \max_i \left(\left| \Sigma_u^{\varepsilon_i}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) - \Sigma_*^{\varepsilon_i} \right| \right), \\ &F\left(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \Sigma_*^{\varepsilon_i}\right) \to \min, \\ &\mathbf{x} \in \mathbf{X}, \end{aligned} \qquad (4.14)$$

где $\Sigma_u^{\varepsilon_i}(\mathbf{x}, \mathbf{u})$ – значения интенсивности напряжений, рассчитываемые по модели в точках ε_i, $\Sigma_*^{\varepsilon_i}$ – соответствующие значения, определенные экспериментально. Стоит обратить внимание, что совокупность соотношений модели (2.29)–(2.32), (2.39), (2.45), (2.52)–(2.55), (2.57) и (2.66) является ограничениями, накладываемыми на параметры **x**. Алгоритм численного решения поставленной задачи включает следующие этапы:

1. Разбиение исходной области **X** на 12 симплексов одинакового объема: сначала куб разбивается на 6 пирамид, вершиной которых является геометри-

ческий центр куба, далее каждая пирамида делится пополам по диагонали грани куба.

2. Точки вершин каждого найденного симплекса являются стартовыми для алгоритма поиска минимума методом Нелдера–Мида с целевой функцией $\mathrm{F}\ \mathbf{x},\mathbf{u},\Sigma_*^{\varepsilon_i}$ (4.14). Критерием останова алгоритма являлось уменьшение объема симплекса относительно стартового в 5 раз.
3. Из 12 полученных решений $\widehat{\mathbf{x}}_n^k$ (n–номер цикла) отбираются 3 вектора $\breve{\mathbf{x}}_n^i$ по критерию $(4.14)_2$, доставляющих минимальные значения функционалу $\mathrm{F}\ \breve{\mathbf{x}}_n^k,\mathbf{u},\Sigma_*^{\varepsilon_i}$. Для каждого $\breve{\mathbf{x}}_n^i$ строится область $\mathbf{X}_n^i$ в форме куба, при этом его центр соответствует $\breve{\mathbf{x}}_n^i$, грани параллельны граням исходной области **X**, а объем в 9 раз меньше объема исходной области. На данном этапе происходит увеличение номера цикла на единицу.
4. Для каждого найденного куба воспроизводятся этапы 1-3. При этом под исходной областью будет пониматься область $\mathbf{X}_n^i$. Критерий останова всего алгоритма является уменьшение объема симплекса в 10^3 раз относительно объема области **X** для каждой задачи, решаемой на этапе 2.
5. Выбор из всех полученных векторов $\breve{\mathbf{x}}_n^i$ вектора, доставляющего функционалу (4.14) наименьшее значение – $\tilde{\mathbf{x}}$.

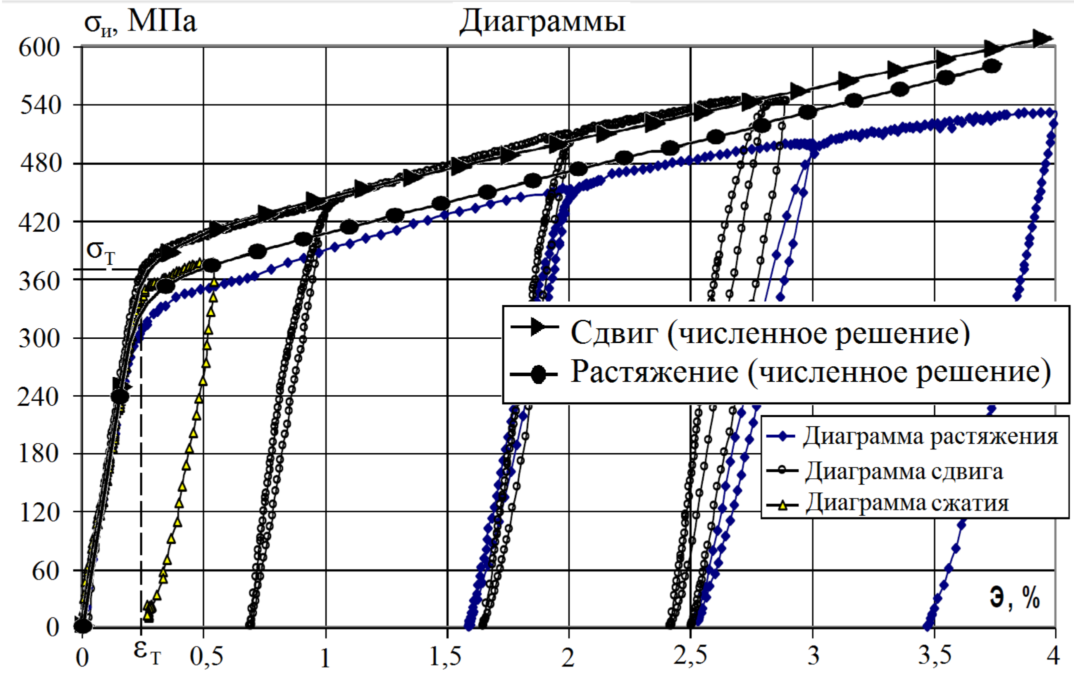

Рис. 4.2. Сопоставление численных решений при оптимальных значений параметров $\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{u}$ и экспериментальных данных (рис. 4.1)

Идентификация параметров производилась по экспериментальным данным, полученным для нагружения кручением (простым сдвигом). Стоит обратить внимание, что на рис. 4.1 представлены экспериментальные результаты нагружения сжатием, растяжением и кручением (сдвигом) по лучевым траекториям деформаций с последовательными разгрузками, в связи с этим на графиках наблюдаются ниспадающие участки упругих разгрузок с последующим упругим нагружением. При этом нырок интенсивности напряжений не наблюдается ввиду продолжения нагружения (после разгрузки) вдоль исходного направления; известно, что нырок наблюдается при изломе траектории деформирования и глубина его пропорциональна углу излома в пространстве деформаций. В связи с этим ниспадающие участки кривых могут быть исключены из рассмотрения при решении задачи идентификации, в противном случае рассмотрению подлежат только участки до 1% полных деформаций, т.е. до первой разгрузки.

В результате решение был получен вектор оптимальных параметров:

$$\tilde{\mathbf{x}} = \left\{ \tilde{\xi}_0,\ \tilde{\psi},\ \tilde{\delta} \right\} = \left\{ 0.0048,\ 0.125,\ 0.161 \right\}, \qquad (4.15)$$

при котором максимальное значение функционала (4.14) составляет менее 0.02. После этого была проведена верификация путем реализации нагружения растяжением при полученных оптимальных параметрах $\tilde{\mathbf{x}}$. Максимальное отклонение значений интенсивности напряжений в соответствующих точках натурной и полученной в численном эксперименте зависимостей не превысило 7% (рис. 4.2). Полученное решение задачи идентификации и верификации можно считать удовлетворительным. В дальнейшем по умолчанию будут использоваться параметры $\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{u}$, соответствующие материалу Ст45. Заметим, что данная модель была также идентифицирована для материала Ст40 [141], однако ввиду наличия большего объема натурных экспериментов, дальнейшее сравнение результатов будет проведено для Ст45.

4.3. Результаты исследования нагружения при малых градиентах перемещений

В разделе 4.2 приведены оптимальные значения параметров конститутивной модели материла по экспериментальным данным нагружения по лучевым траекториям деформаций. В связи с ориентированностью данной работы на сложное нагружение, в настоящем параграфе представлены результаты численного моделирования нагружения по траекториям, представляющим собой многозвенные ломаные, с целью оценки адекватности описания данных процессов. Как отмечалось выше, в настоящее время отсутствуют результаты экспериментов по сложному нагружению для больших градиентов перемещений. В то же время следует отметить, что механизмы деформирования и их описание в предлагаемой модели не зависят от величины деформаций. В связи с этим проверка адекватности модели была реализована для случая сложного нагружения при малых градиентах перемещений. Стоит обратить внимание, что ввиду малости конечных полных деформаций, нагружение (траектория деформаций) определялось в терминах неподвижного наблюдателя в ЛСК.

Показано хорошее соответствие значений эволюционирующих параметров, характеризующих векторные и скалярные свойства представительного объема материала, известным экспериментальным данным. Также получено подтверждение выполнения постулата изотропии А.А. Ильюшина для траекторий с тремя точками излома. Все представленные результаты численных расчетов получены для материала Ст45, для которого параметры модели приведены в параграфе 4.2. Исследуемый модельный материал (представительный объем) состоял из выборки 1728 кристаллитов, ориентированных случайным образом по равномерному закону.

На рис.4.3 схематично изображен набор двухзвенных ломаных; для всех рассмотренных процессов нагружения первый этап представляет собой деформирование вдоль направления $Э_4$ до полных деформаций 1%, далее происходит излом траектории на угол от 0º до 157,5º, кратный 22,5º, и последующее деформирование вдоль нового направления также до 1%.

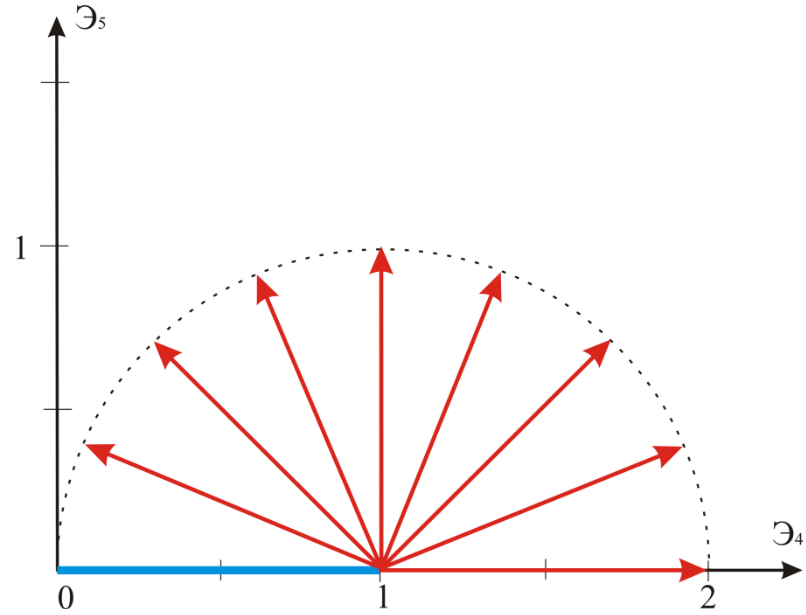

Рис. 4.3. Схематичное изображение двухзвенных траекторий в плоскости $Э_4Э_5$

На рисунке (рис. 4.4) представлены полученные численно зависимости интенсивностей напряжений от интенсивности деформаций для указанных траекторий; на рис. 4.5 представлены экспериментальная [14] и полученная численно зависимости минимального значения интенсивности напряжений после излома траектории от угла предшествующего излома траектории, характеризующие глубину «нырка» интенсивности напряжений.

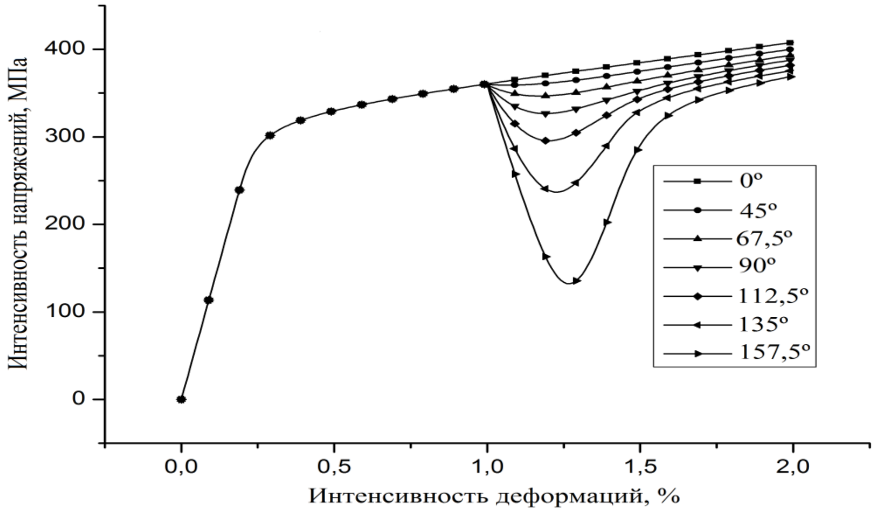

Рис. 4.4. Зависимости интенсивности напряжений от накопленной деформации для траекторий с изломом (рис. 4.3)

Представленные на рис. 4.4 зависимости подтверждают известный из натурных экспериментов факт: интенсивность напряжений после излома траектории восстанавливается не полностью и имеет значение ниже интенсивности в отсутствие излома [34]. Другими словами, график зависимости интенсивности напряжений от деформаций после излома траектории находится не выше соответствующего графика без излома траектории.

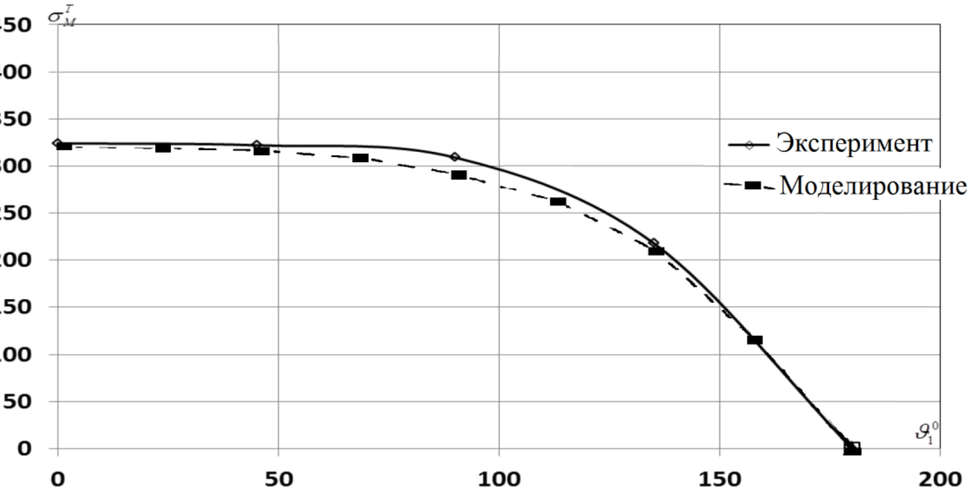

Рис. 4.5.Сравнение результатов численного моделирования и эксперимента[14]: зависимость минимальной интенсивности напряжений от угла излома

Удовлетворительное соответствие представленных зависимостей численного и натурного экспериментов (рис. 4.5) подтверждают адекватность построенной конститутивной модели материала.

На рис. 4.6. приведены экспериментальные (слева) и полученные численно (справа) зависимости угла υ между вектором напряжений и касательной к траектории деформации при различных углах излома траектории. Данные численного моделирования показывают, что после излома траектории деформации скорость восстановления угла υ (его уменьшения) тем выше, чем выше значение угла излома траектории. При этом по истечению 1% деформаций после точки излома угол υ принимает значение порядка 10^{o} для всех указанных траекторий (рис. 4.3). Удовлетворительное соответствие численных результатов экспериментальным данным также подтверждает адекватность модельного описания деформирования материала при сложном нагружении.

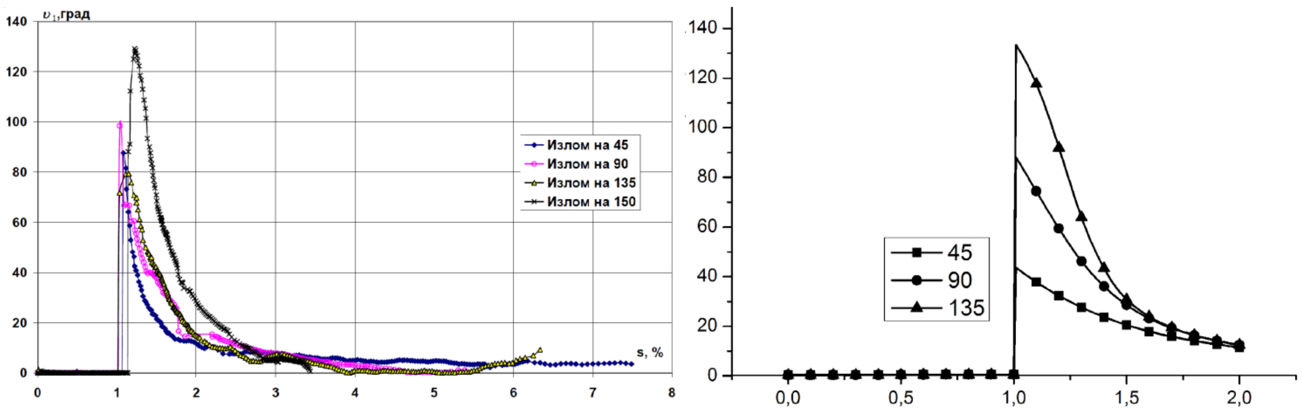

Рис. 4.6. Сравнение результатов численного моделирования и эксперимента [14]: зависимость угла между вектором напряжений и касательной к траектории деформации

Отдельное внимание стоит уделить причинам, приводящим к изменению ориентации (стремлению к направлению касательной к траектории) вектора напряжений после излома траектории или при наличии ненулевой кривизны в случае гладкой траектории. В макрофеноменологических теориях пластичности данный факт, исходя из экспериментальных данных, обычно предполагается заранее; например, в теории УПП А.А. Ильюшина принимается так называемая гипотеза компланарности векторов $\mathbf{S}$, $\dot{\mathbf{S}}$, $\dot{\text{Э}}$, которая в частных теориях приводит к тензорно–алгебраическим соотношениям между векторами $\mathbf{S}$ и **Э** (теория малых упругопластических деформаций) или между $\mathbf{S}$ и $\dot{\mathbf{Э}}$ (для траекторий малой кривизны). После этого производится конкретизация функционалов, входящих в эти соотношения, без углубления в вопросы эволюции внутренней структуры материала. В настоящей работе с помощью построенной конститутивной модели представляется возможным выявить физические причины, приводящие к изменению ориентации вектора напряжений при наличии ненулевой кривизны траектории деформаций.

На рис. 4.7а представлена проекция образа процесса нагружения для траектории с изломом на гиперплоскость $Э_4Э_5$, откуда видно, что направление вектора напряжений $\mathbf{S}$ после излома траектории стремится к направлению касательной к траектории. На рис. 4.7б представлена проекция того же ОПН, где изображены траектория и векторы скорости изменения напряжений $\dot{\mathbf{S}}$ (соответствующий тензору $\dot{\mathbf{\Sigma}}$) и скорости неупругих деформаций $\dot{\mathbf{Э}}^{in}$ (соответствующей тензору $\mathbf{Z}^{in}$). При этом вектор $\dot{\mathbf{S}}$ направлен таким образом, что с течением процесса происходит уменьшение составляющей вектора $\mathbf{S}$ вдоль $Э_5$ и увеличение составляющей вдоль направления траектории после излома ($Э_4$), что приводит к наблюдаемому «повороту» вектора напряжений.

Физические причины запаздывания векторных свойств можно связать со скоростями релаксации искажений решетки, накопленных на предыдущих этапах деформирования, т.е. упругих деформаций. Очевидно, что скольжение дислокаций по системам полностью определяет неупругую составляющую деформаций представительного объема. При используемом жестком (кинематическом) нагружении неупругая составляющая вектора скорости деформаций однозначно определяет упругую составляющую. В соответствии с законом Гука, вектор скорости напряжений пропорционален упругой составляющей скорости деформаций, что показано на рис. 4.7в, при этом максимальное отклонение векторов $\dot{\mathbf{S}}$ и $\dot{\mathbf{Э}}^{e}$ друг от друга наблюдается непосредственно после излома и составляет не более 5^{o}. На первом прямолинейном участке векторы упругой и неупругой составляющих скоростей деформаций и напряжений соосны (угол между $\dot{\mathbf{Э}}^{in}$ и $\mathbf{S}$ не превышает 4^{o}). Если в точке излома угол поворота траектории деформации составляет 180^{o}, то искажения решетки по моде первого участка траектории практически мгновенно (на длине дуги, равной интенсивности упругих деформаций) снимаются и решетка приобретает искажения по «противоположной» моде (например, растяжение сменяется сжатием). Если в точке излома угол отличен от 0 и 180^{o} (для определенности примем его равным 90^{o}), полная деформация по моде первого участка остается неизменной, то искажения решетки по первой моде также сохраняются, соответственно и проекция вектора напряжений на направление первого участка отлична от нулевой. В начале второго прямолинейного участка на искажения по моде первого этапа накладываются искажения решетки по моде второго участка. В случае ортогональных мод искажения накопленные деформации решетки первого этапа нагружения (следовательно – и напряжения первого участка) могут быть устранены только за счет пластических сдвигов по СС, активируемых суммарными напряжениями первого и продолжающегося второго участка. При этом только часть пластических сдвигов, величина которых зависит от угла излома, осуществляет вклад в релаксацию искажений по моде первого участка, чем и обусловлено относительно длительное уменьшение проекции вектора напряжений на направление деформирования первого участка.

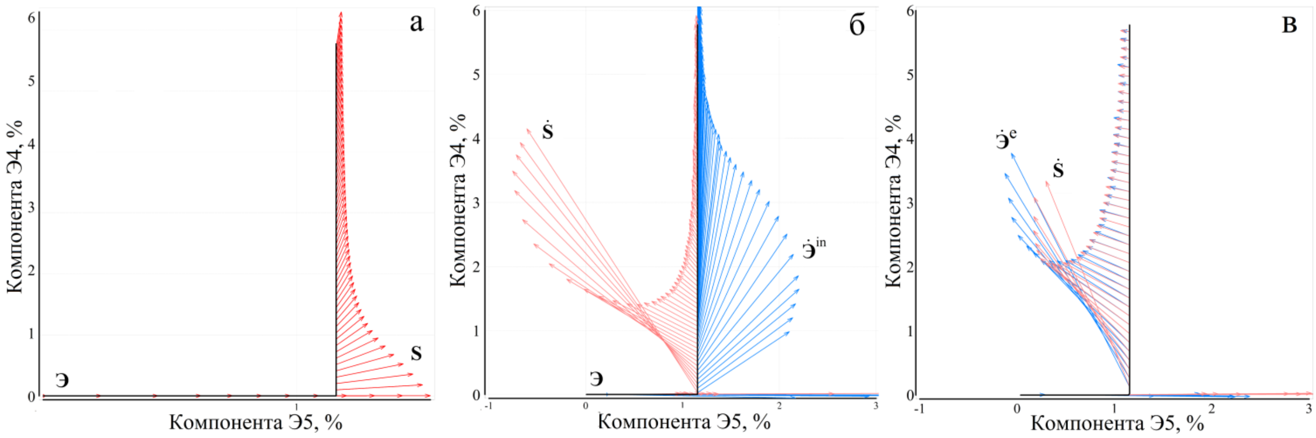

Рис. 4.7. Проекции образа процесса нагружения по траектории с изломом в 90^{o} в плоскости Э$_4$Э$_5$: (а) траектория деформации и вектор напряжений, (б) траектория деформации, векторы скорости напряжений и скорости неупругих деформаций, (в) траектория деформации, векторы скорости напряжений и скорости упругих деформаций

Существенный интерес при постановке и проведении экспериментальных исследований проявляется к проверке постулата изотропии в частной форме: образ процесса нагружения в совмещенном пространстве напряжений и деформаций определяется только внутренней геометрией траектории деформирования, и поэтому остается инвариантным при преобразованиях вращения и отражения относительно любых осей и плоскостей, проходящих через начало координат. Для проверки данного постулата в численных экспериментах была выбрана четырехзвенная траектория с последовательными углами излома 153.3º, 63.3º и 90º соответственно. На рис. 4.9 представлены 4 траектории деформирования в плоскости $Э_4Э_5$, получаемые друг из друга вращением в данной плоскости; K_0, K_1 и K_2обозначают точки излома траекторий.

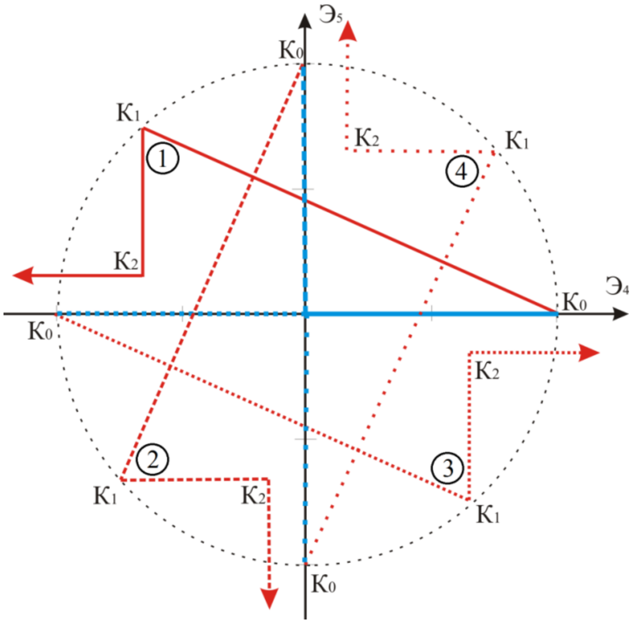

Рис. 4.9. К проверке постулата изотропии: четырехзвенные траектории деформирования с одинаковой внутренней геометрией

На рис. 4.10 представлены образы процессов нагружения для траекторий деформаций, изображенных на рис. 4.9;отрезками прямых со стрелками изображены текущие векторы напряжений, сплошной линией – траектории деформаций. Визуально ОПН для данных траекторий неотличимы, в связи с чем были вычислены параметры(1.13) –(1.16), характеризующие точность совпадения ОПН. При этом в качестве эталонного был взят ОПН, соответствующий нагружению по траектории, изображенной на рис. 4.9 сплошной линией, который сравнивался с остальными тремя. Для трех пар ОПН были получены значения указанных параметров, максимальные значения из которых равны:

$$\eta = 1.5 \cdot 10^{-3}, \quad \bar{\eta} = 0.6 \cdot 10^{-3},$$
$$\theta = 9.5 \cdot 10^{-4}, \quad \bar{\theta} = 2.3 \cdot 10^{-4}, \tag{4.16}$$

что позволяет говорить о достаточно высокой степени совпадения ОПН. Также для трех пар ОПН были вычислены параметры (1.17) – (1.18), характеризующие степень отклонения вектора напряжений от плоскости, в которой находится траектория деформаций, и получены максимальные значения:

$$\lambda = 0.014, \quad \bar{\lambda} = 0.008, \tag{4.17}$$

что соответствует максимальной длине составляющей вектора напряжений, перпендикулярной плоскости траектории, не превышающей 5.5 МПа, при длине вектора 408 МПа.

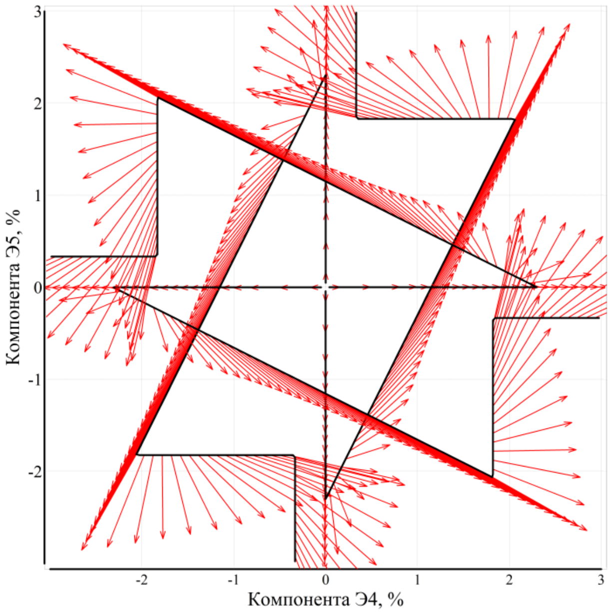

Рис. 4.10. К проверке постулата изотропии: ОПН, полученные в результате численного моделирования для четырехзвенных траекторий (рис. 4.9)

На рис. 4.11 представлены для сравнения экспериментальные зависимости (слева) угла υ между вектором напряжений и касательной к траектории и полученные в результате численного моделирования (справа) для траекторий, изображенных на рис. 4.9.

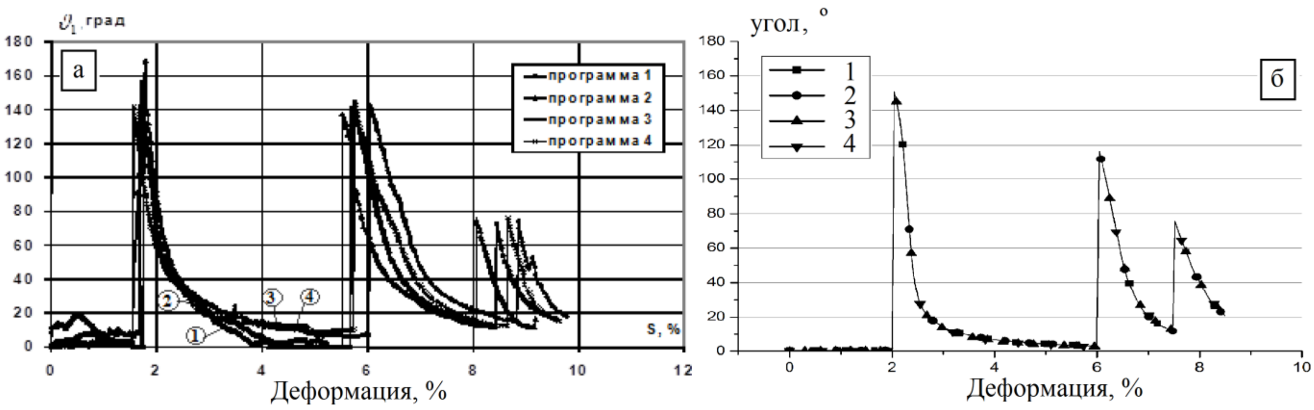

Рис. 4.11. К проверке постулата изотропии: экспериментальная (а) и полученная численно (б) зависимости угла υ для четырехзвенных траекторий (рис. 4.9)

Представленные в данном параграфе результаты численного моделирования показали хорошее согласование с данными известных натурных экспериментов по исследованию векторных и скалярных свойств процесса. Также в результате численного моделирования нагружения по траекториям с одинаковой внутренней геометрией было показано выполнение постулата изотропии А.А. Ильюшина (в частной форме) с высокой степенью точности для четырехзвенной траектории, что хорошо согласуется с известными экспериментальными данными.

4.4. Результаты численного моделирования нагружения при больших градиентах перемещений

В настоящем параграфе представлены результаты численных экспериментов для ряда траекторий различной степени сложности в случае больших градиентов перемещений. Задание траекторий и построение образов процесса производилось в терминах подвижной системы координат (ПСК) (за исключением специально оговоренных случаев); векторы напряжений и деформаций и их компоненты в базисе ПСК обозначаются чертой сверху. Как отмечено ранее, большой интерес со стороны экспериментаторов проявляется к проверке выполнения постулата изотропии А.А. Ильюшина в частной форме, однако для случая больших градиентов перемещений ввиду ряда причин (раздел 1.3) экспериментальные данные в настоящий момент отсутствуют. Для оценки точности выполнения данного постулата в случае больших градиентов перемещений была использована построенная двухуровневая конститутивная модель материала. При этом для разложения движения на квазитвердое и деформационное для сравнения были приняты две гипотезы (Γ_{Ω} и Γ_{W}),подробно описанные в разделе 3.3. Напомним, что в случае принятия первой гипотезы (Γ_{Ω}) спин ПСК$_{\Pi}$ макроуровня равен среднему значению спина мезоуровня – $\boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle$, при этом модель ротации мезоуровня в общем случае произвольна и должна удовлетворять лишь условию физической адекватности. В этом случае на мезоуровне в качестве модели ротации используется физически обоснованная модель, основанная на привязке к решетке кристаллита, описанная в разделе 3.2. В случае принятия гипотезы Γ_{W} спин макроуровня в точности равен вихрю **W**, определенному с позиций неподвижного наблюдателя в ЛСК; в разделе 3.3 показано, что в данном случае для удовлетворения условий согласования определяющих соотношений различных масштабных уровней спин мезоуровня **ω** также должен быть равен вихрю **W**, что является жестким ограничением на выбор модели ротации.

Для траекторий различной степени сложности были проведены численные эксперименты по нагружению представительного объема материала Ст45. Траектории деформации были заданы зависимостью вектора касательной к траектории от её длины. При этом задаются тривиальные начальные условия:

$$\bar{Э}_i \Big|_{Э_s=0} = \ 0,0,0,0,0,0,0,0,0 \ , \tag{4.18}$$

которые принимаются везде далее по умолчанию.

Первые две траектории с одинаковой внутренней геометрией, для которых проводилась проверка, определены следующими соотношениями:

$$\begin{aligned} &1) \ \dot{\bar{Э}}_i \ = \ 0,0,0,0,1,0,0,0,0 \ , Э_s \in \ 0,0.5 \ \to \\ &\to \ \dot{\bar{Э}}_i \ = \ 0,0,0,0,0,1,0,0,0 \ , Э_s \in \ 0.5,1 \ , \end{aligned} \tag{4.19}$$

$$\begin{aligned} &2) \ \dot{\bar{Э}}_i \ = \ 0,0,0,0,0,1,0,0,0 \ , Э_s \in \ 0,0.5 \ \to \\ &\to \ \dot{\bar{Э}}_i \ = \ 0,0,0,0,1,0,0,0,0 \ , Э_s \in \ 0.5,1 \ . \end{aligned} \tag{4.20}$$

Данные траектории описывают последовательные сдвиги до 50% полных деформаций в различных плоскостях и получаются одна из другой отражением относительно плоскости $\bar{\text{Э}}_5 - \bar{\text{Э}}_6 = 0$. Для удобства обозначим траекторию (4.19) как I_1, траекторию (4.20) как I_2.

Следующие траектории задаются последовательностью одного лучевого и трех круговых участков:

$$
\begin{aligned}
3)\ \ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = 0,0,0,1,0,0,0,0,0\ , \text{Э}_s \in\ 0,0.05\ \rightarrow \\
\rightarrow\ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \left\{0,0,0,\cos\left(\ \text{Э}_s - 0.05\ \frac{\pi}{0.5}\right), \sin\left(\ \text{Э}_s - 0.05\ \frac{\pi}{0.5}\right), 0,0,0,0\right\}, \text{Э}_s \in\ 0.05,0.3\ \rightarrow \\
\rightarrow\ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \left\{0,0,0,\sin\left(\ \text{Э}_s - 0.3\ \frac{\pi}{0.5}\right), \cos\left(\ \text{Э}_s - 0.3\ \frac{\pi}{0.5}\right), 0,0,0,0\right\}, \text{Э}_s \in\ 0.3,0.55\ \rightarrow \\
\rightarrow\ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \{0,0,2\sin(\text{Э}_s - 0.55\ ), 2\cos(\text{Э}_s - 0.55\ ), 0,0,0\ \}, \text{Э}_s \in [0.55,1\ ]
\end{aligned}
\tag{4.21}
$$

$$
\begin{aligned}
4)\ \ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \left\{0,0,0,\frac{\sqrt{2}}{2},\frac{\sqrt{2}}{2},0,0,0,0\right\}, \text{Э}_s \in\ 0,0.05\ \rightarrow \\
\rightarrow\ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \left\{0,0,0,\sin\left(\ \text{Э}_s - 0.05\ \frac{\pi}{0.5} + \frac{\pi}{4}\right), \cos\left(\ \text{Э}_s - 0.05\ \frac{\pi}{0.5} + \frac{\pi}{4}\right), 0,0,0,0\right\}, \text{Э}_s \in\ 0.05,0.3\ \rightarrow \\
\rightarrow\ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \left\{0,0,0,\cos\left(\ \text{Э}_s - 0.3\ \frac{\pi}{0.5} + \frac{\pi}{4}\right), -\sin\left(\ \text{Э}_s - 0.3\ \frac{\pi}{0.5} + \frac{\pi}{4}\right), 0,0,0,0\right\}, \text{Э}_s \in [0.3,0.55\ ] \rightarrow \\
\rightarrow\ & \dot{\bar{\text{Э}}}_i = \left\{0,0,0,2\cos\left((\text{Э}_s - 0.55\ ) + \frac{\pi}{4}\right), 2\sin\left((\text{Э}_s - 0.55\ ) + \frac{\pi}{4}\right), 0,0,0,0\right\}, \text{Э}_s \in [0.55,1\ ].
\end{aligned}
\tag{4.22}
$$

Данные траектории деформаций получаются одна из другой отражением относительно плоскости, заданной уравнением $\bar{\text{Э}}_4 \sin\frac{\pi}{8} - \bar{\text{Э}}_5 \cos\frac{\pi}{8} = 0$ и состоят из четырех этапов нагружения с двумя гладкими переходами и одним изломом на 90°. В точке перехода от первого участка ко второму совпадают только значения векторов деформаций и первой производной (касательной к траектории). В точке перехода от второго участка к третьему совпадают значения векторов деформаций и все нечетные производные; производные четного порядка совпадают с точностью до знака, что говорит о смене знака кривизны при переходе. Приведенные программы деформирования обозначены как II_1 и II_2.

Рассмотрены также трехмерные траектории, определяемые соотношениями:

$$5)\quad \dot{\bar{Э}}_i \;=\; 1,0,0,0,0,0,0,0,0 \;,Э_s\in\; 0,0.33 \;\to$$
$$\to\; \dot{\bar{Э}}_i \;=\; 0,0,0,1,0,0,0,0,0 \;,Э_s\in\; 0.33,0.66 \;\to \qquad (4.23)$$
$$\to\; \dot{\bar{Э}}_i \;=\; 0,0,0,0,1,0,0,0,0 \;,Э_s\in\; 0.66,1 \;,$$

$$6)\quad \bar{Э}_i \;=\; 0,0,0,0,1,0,0,0,0 \;,Э_s\in\; 0,0.33 \;\to$$
$$\to\; \bar{Э}_i \;=\; 1,0,0,0,0,0,0,0,0 \;,Э_s\in\; 0.33,0.66 \;\to \qquad (4.24)$$
$$\to\; \bar{Э}_i \;=\; 0,0,0,1,0,0,0,0,0 \;,Э_s\in\; 0.66,1 \;,$$

описывающими последовательные растяжение и сдвиги в различных плоскостях; траектории получаются одна из другой поворотом на 120° вокруг оси $1,0,0,1,1,0,0,0,0$ в пространстве $\aleph^{(9)}$;траектории обозначены как III_1 и III_2 соответственно. Геометрия описанных траекторий представлена на рисунках 4.12 (а)-(в).

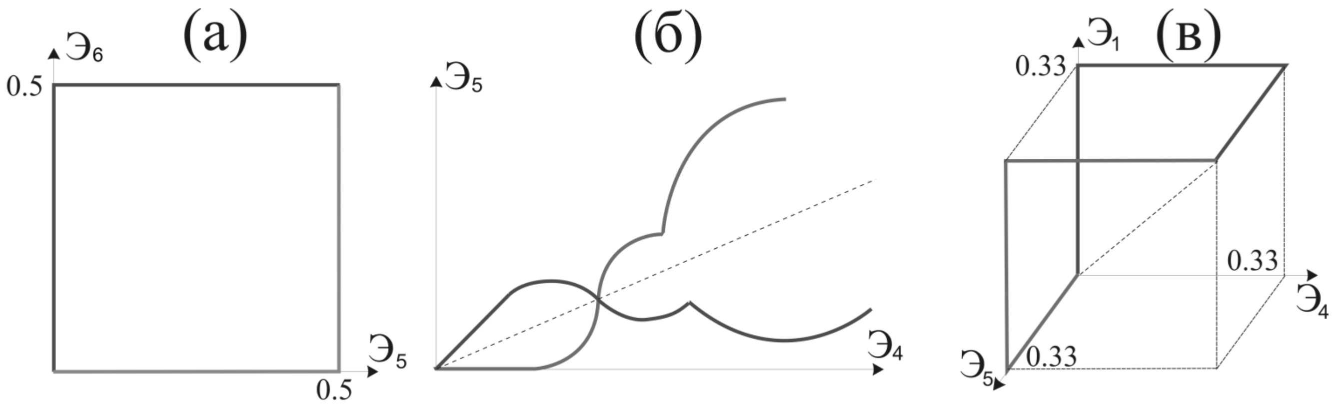

Рис. 4.12. К проверке постулата изотропии в случае больших градиентов перемещений: траектории деформирования различной степени сложности

Для приведенных траекторий были выполнены расчеты по нагружению представительного макрообъема (макрообразца) материала Ст45 в случае принятия гипотез Γ_Ω и Γ_W. Напомним, что как параметры процессов нагружения, так и все образы процессов нагружения, представленные ниже, определены в подвижной системе координат, спин которой определяется гипотезой Γ_Ω или Γ_W. Ниже представлена сравнительная таблица для значений параметров $\eta,\theta,\bar{\eta},\bar{\theta},\lambda,\bar{\lambda}$, характеризующих точность выполнения постулата изотропии, в случае применения гипотез Γ_Ω и Γ_W (табл. 1).

Таблица 1

Сводная таблица значений параметров $\eta, \theta, \bar{\eta}, \bar{\theta}, \lambda, \bar{\lambda}$ для процессов I_1, I_2 при принятии гипотез Γ_Ω и Γ_W

параметр	гипотеза Γ_Ω	гипотеза Γ_W
η	0.011	0.011
$\bar{\eta}$	0.006	0.006
θ	0.085	0.028
$\bar{\theta}$	0.051	0.018
λ	0.117	0.014
$\bar{\lambda}$	0.078	0.008

Отметим, что различия отклонений образов процессов по скалярным характеристикам $\eta, \bar{\eta}$ практически отсутствует при принятии обеих гипотез. Отличие отклонений по векторным характеристикам $\theta, \bar{\theta}$ значительно более существенно в случае принятия гипотезы Γ_Ω. Значения параметров $\lambda, \bar{\lambda}$, характеризующие отклонение вектора напряжений от гиперплоскости, содержащей траекторию, имеют бóльшие значение в случае принятия Γ_Ω. При этом стоит отметить, что значения параметров $\lambda, \bar{\lambda}$ вычислялись для каждого ОПН в отдельности, однако ввиду их близости для траекторий с одинаковой геометрией в таблице указаны их средние значения по двум ОПН. Таким образом, основываясь на сравнительных характеристиках скалярных $\eta, \bar{\eta}$ и векторных $\theta, \bar{\theta}, \lambda, \bar{\lambda}$ свойств, можно сделать вывод о том, что постулат изотропии в случае больших градиентов перемещений выполняется с большей точностью при принятии гипотезы Γ_W. Данный факт объясняется тем, что в отличие от гипотезы Γ_W в случае принятия гипотезы Γ_Ω модель предсказывает образование текстуры, что подтверждается данными натурных и численных экспериментов, результаты которых представлены ниже. В конце первого этапа (сдвиг до 0.5 полных деформаций) ввиду образования текстуры возникает анизотропия механических свойств. При последующем нагружении в ином направлении в пространстве деформации (относительно первого этапа) отклик материала будет различным (рис. 4.13), что приводит к понижению точности выполнения постулата изотропии при принятии Γ_Ω. При этом стоит обратить внимание на то, что в случае гипотезы Γ_W нет возможности применения физически обоснованной модели ротации мезоуровня без нарушения условий согласования определяющих соотношений масштабных уровней.

Постулат изотропии был сформулирован для начально изотропных материалов, при этом наведенная анизотропия вследствие интенсивных пластических деформаций не исключается из рассмотрения. Однако до настоящего времени данный постулат проверялся и проверяется в реальных экспериментах исключительно при умеренных деформациях (не более 5%), когда текстура материала практически отсутствует. В связи с этим для случая больших градиентов перемещений необходимо более глубокое исследование постулата изотропии и, возможно, его модификация для учета существенного изменения симметрийных свойств материала (наведенной анизотропии материала).

Результаты оценки точности выполнения постулата изотропии для траекторий II_1 и II_2 (рис. 4.12 б) с помощью введенных выше мер представлены в табл. 2.

Таблица2

Сводная таблица значений параметров $\eta,\theta,\bar{\eta},\bar{\theta},\lambda,\bar{\lambda}$ для процессов II_1 и II_2априпринятии гипотез Γ_Ω и Γ_W

параметр	Гипотеза Γ_Ω	Гипотеза Γ_W
η	0.052	0.051
$\bar{\eta}$	0.016	0.016
θ	0.082	0.037
$\bar{\theta}$	0.051	0.018
λ	0.092	0.033
$\bar{\lambda}$	0.064	0.022

Из приведенной таблицы (табл. 2) видно, что, как и в случае с траекториями I_1 и I_2, различия отклонений образов процессов при принятии гипотезы Γ_Ωболее существенно. При этом относительно нагружения по траекториям I_1 и I_2 отклонение ОПН для этой же гипотезы менее существенно, что вызвано образованием менее острой текстуры ввиду отсутствия протяженных лучевых участков нагружения.

В табл. 3 приведены значения параметров $\eta,\theta,\bar{\eta},\bar{\theta},\lambda,\bar{\lambda}$ для нагружения по трехмерным траекториям III_1 и III_2 (рис. 4.12в).

Таблица 3

Сводная таблица значений параметров $\eta,\theta,\bar{\eta},\bar{\theta},\lambda,\bar{\lambda}$ для процессов III_1 и III_2 при принятии гипотез Γ_Ω и Γ_W

параметр	Гипотеза Γ_Ω	Гипотеза Γ_W
η	0.035	0.037
$\bar{\eta}$	0.008	0.011
θ	0.103	0.049
$\bar{\theta}$	0.071	0.036
λ	0.119	0.062
$\bar{\lambda}$	0.081	0.050

Значения скалярных характеристик, как и в двух ранее рассмотренных случаях, говорят об определенных различиях ОПН попарно сравниваемых траекторий в случае принятия обеих гипотез. Значения параметров, характеризующих отклонения векторных свойств двух ОПН (θ – отклонение векторов напряжений друг от друга в сравниваемых ОПН, λ – отклонение вектора напряжений от плоскости траектории), имеют значения на 10-15% выше, чем в предыдущем случае. При этом, как и для двух предыдущих типов траекторий, в случае принятия гипотезы Γ_Ω точность выполнения постулата изотропии ниже, чем в случае гипотезы Γ_W, что вызвано образованием текстуры в первом случае. Описание образования текстуры в материале при принятии гипотезы Γ_Ω более подробно рассмотрено ниже.

В предшествующих примерах показано, что постулат изотропии выполняется с различной степенью точности при принятии двух гипотез о разложении для траекторий различной степени сложности. При этом степень точности его выполнения несколько ниже, чем в случае малых градиентов перемещений. Вероятно, в случае интенсивного деформирования необходима некоторая модификация данного постулата, учитывающий приобретаемую анизотропию свойств. К сожалению, экспериментальные подтверждения его выполнения при больших градиентах перемещений в настоящее время отсутствуют.

Для оценки степени наведенной деформированием анизотропии материала (только для гипотезы Γ_{Ω}) был проведен ряд численных экспериментов: на первом этапе представительный объем подвергался интенсивному деформированию (до 100%) вдоль направления $\bar{Э}_4$ (деформирование задано в ПСК$_{П}$), на втором этапе материал был деформирован вдоль одного из направлений $\bar{Э}_1, \bar{Э}_2, \bar{Э}_3, \bar{Э}_5, \bar{Э}_6$. Таким образом, к концу первого этапа деформирования материал имел четко выраженную текстуру и, как следствие, анизотропию свойств. На рис. 4.13 показано, что значения характеристик внутренней структуры изменяются различным образом в зависимости от направления последующего деформирования.

На рис. 4.13 изображены зависимости ряда характеристик от интенсивности деформации после излома траектории. Из представленных зависимостей видно, что значительно отличаются результаты для растяжения (нагружение вдоль $\bar{Э}_1, \bar{Э}_2, \bar{Э}_3$ – 1, 2, 3 на графиках) и сдвига (вдоль $\bar{Э}_5, \bar{Э}_6$ – 5, 6 на графиках). Это объясняется различным напряженно-деформированным состоянием (НДС) при растяжении и сдвиге. Однако, если учесть факт различия между сдвигом и растяжением, и разделить их условно на две группы, то даже внутри этих групп различия между величинами, характеризующими состояние материала, будут значительными. Так, например, при растяжении вдоль трех различных осей после интенсивного сдвига максимальное различие между значениями интенсивностей напряжений достигает 6% (рис. 4.13а), тогда как для начально изотропного материала различия не превышают 1%. Разделение на группы также отчетливо видно на рис. 4.13б и 4.13в. Значение средней угловой скорости (рис. 4.13в) вращения кристаллитов для последующего сдвига вдоль различных направлений отличается более чем на 10%. Значения данной характеристики для растяжения вдоль различных направлений отличаются более чем на порядок, хотя стоит отметить, что их величины малы по сравнению с полученными для нагружения сдвигом. Зависимости значения угла между вектором напряжений и касательной к траектории (рис. 4.13г) также свидетельствуют об их различиях для отличающихся траекторий деформирования на втором этапе.

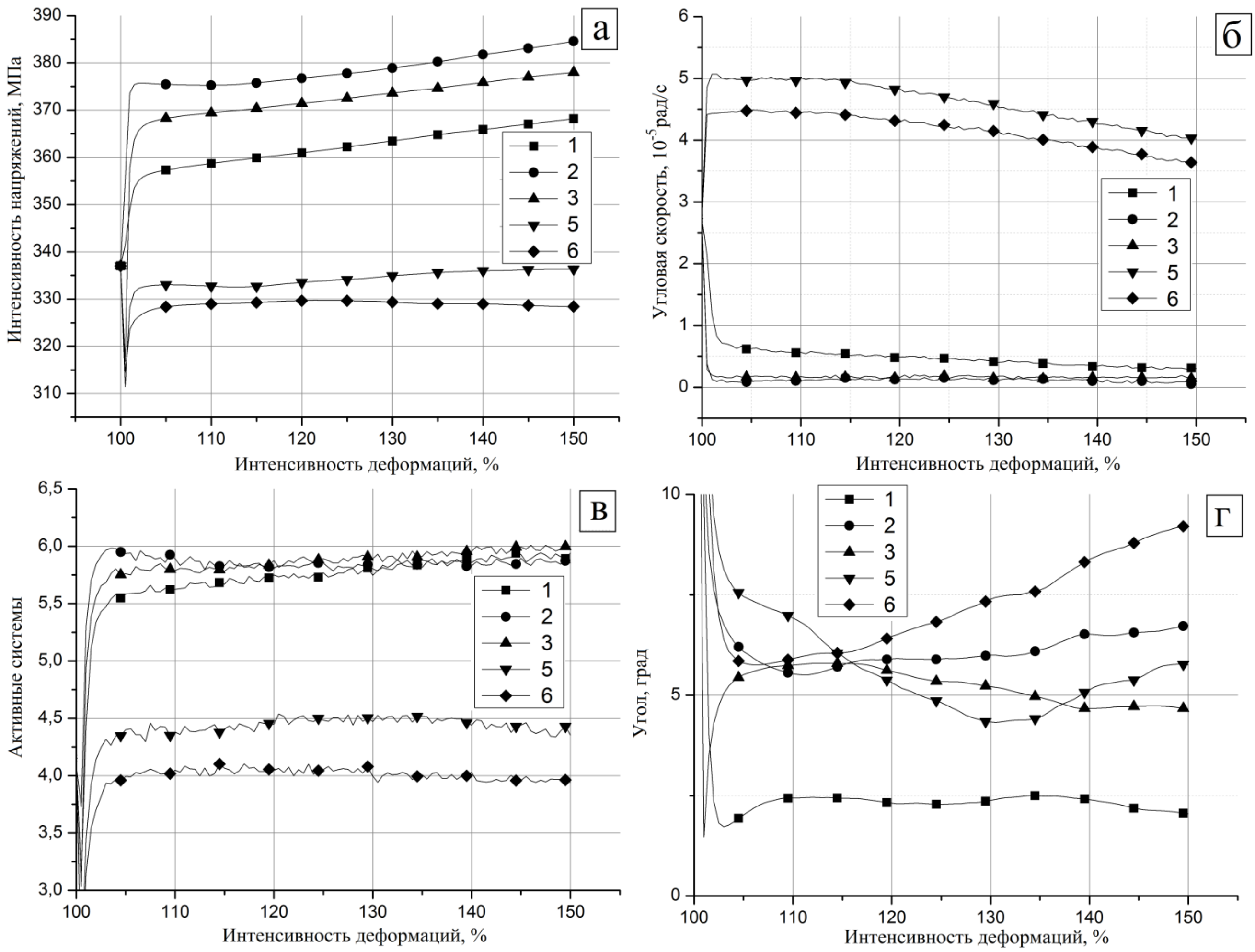

Рис. 4.13. К оценке степени анизотропии материала после сдвига на 100% в случае принятия Γ_{Ω}: а – интенсивность напряжений, б – угол между **S**и $\dot{\mathbf{Э}}$, в – средняя угловая скорость ПСК$_K$, г – среднее число активных СС

Описанная процедура нагружения представительного объема вдоль различных направлений в пространстве деформаций позволяет оценить влияние наведенной анизотропии в ходе предшествующего интенсивного нагружения на механические свойства материала. Вероятно, для получения более точной оценки необходимо производить нагружение вдоль большего числа направлений. Другим вариантом оценки влияния анизотропии может быть исследование текстуры материала, например, введение скалярных параметров, характеризующих её остроту.

Рассмотрим результаты численного эксперимента по нагружению по одинаковым траекториям в терминах ЛСК и ПСК. Данные численные эксперименты необходимы для оценки степени близости (или различия) ОПН при нагружении в терминах подвижной и неподвижной систем координат. При этом необходимо обратить внимание на то, что компоненты векторов напряжений и деформаций определялись в той СК, в которой задано нагружение. Если определять данные компоненты с позиций одного наблюдателя, то траектории деформаций будет невозможно совместить в каждой точке только ортогональными преобразованиями. Требование совмещения траекторий необходимо для возможности сравнения ОПН (раздел 1.3). В качестве траекторий были выбраны двухзвенные ломаные; в терминах ЛСК:

$$\begin{aligned} &\dot{Э}_i \;=\; 0,0,0,1,0,0,0,0,0 \;, Э_s \in\; 0,0.5 \;\rightarrow \\ \rightarrow\; &\dot{Э}_i \;=\; 0,0,0,0,0,1,0,0,0 \;, Э_s \in\; 0.5,1 \;, \end{aligned} \tag{4.25}$$

и в терминах ПСК:

$$\begin{aligned} &\dot{\bar{Э}}_i \;=\; 0,0,0,1,0,0,0,0,0 \;, Э_s \in\; 0,0.5 \;\rightarrow \\ \rightarrow\; &\dot{\bar{Э}}_i \;=\; 0,0,0,0,0,1,0,0,0 \;, Э_s \in\; 0.5,1 \;. \end{aligned} \tag{4.26}$$

Данные траектории представляют собой последовательные простые сдвиги в двух плоскостях. Очевидно, что траектория (4.25) с позиции наблюдателя в ЛСК и траектория (4.26) с позиции наблюдателя в ПСК неразличимы (в совмещенном пространстве), и, как следствие, имеют одинаковую внутреннюю геометрию, что позволяет оценить получаемые ОПН с помощью введенных параметров $\eta,\theta,\bar{\eta},\bar{\theta}$. В качестве гипотезы о разложении движения была принята гипотеза $Г_Ω$. Ниже в таблице 4 представлены значений указанных параметров.

Таблица 4

Сводная таблица значений параметров $\eta,\theta,\bar{\eta},\bar{\theta}$ для процессов (4.25) и (4.26) при принятии гипотезы Γ_Ω

параметр	для ОПН в ЛСК и ПСК
η	0.011
$\bar{\eta}$	0.004
θ	0.101
$\bar{\theta}$	0.073

Анализ результатов показывает, что максимальное отклонение скалярных характеристик (интенсивностей напряжений) не превышает 1.2% (параметры η и $\bar{\eta}$), что свидетельствует о близости кривых напряжение-деформация для процессов (4.25) и (4.26). Параметры θ и $\bar{\theta}$, характеризующие отклонение векторов напряжений, показывают, что угол между векторами напряжений двух процессов достигает значения 6^{o}. Стоит отметить, что векторы напряжений имеют отклонение в одну сторону относительно плоскости траектории, но имеют отличаются значениями этого отклонения, что показывают результаты, представленные в таблице 5.

В таблице 5 представлены значения параметров λ и $\bar{\lambda}$, характеризующих отклонение вектора напряжений от плоскости траектории; данные параметры вычисляются для каждого ОПН в отдельности.

Таблица 5

Сводная таблица значений параметров λ и $\bar{\lambda}$ для процессов (4.25) и (4.26) при принятии гипотезы Γ_Ω

параметр	нагружение в ЛСК	нагружение в ПСК
λ	0.105	0.036
$\bar{\lambda}$	0.089	0.025

Представленные в таблице 5 результаты говорят о значительно большем отклонении вектора напряжений от плоскости траектории в случае задания нагружения в ЛСК, чем при определении его в ПСК.

Полученные значения параметров $\eta, \theta, \overline{\eta}, \overline{\theta}$ позволяют судить об удовлетворительном соответствии полученных ОПН, которое находится на уровне соответствия ОПН при проверке постулата изотропии на различных траекториях с одинаковой внутренней геометрией. Как было отмечено выше, это вызвано отклонением вектора напряжений в одну и ту же строну относительно плоскости траектории, т.е. при совмещении данных ОПН векторы напряжений достаточно близки. Однако в случае определения нагружения в терминах ЛСК вектор напряжений испытывает более существенные отклонения от плоскости траектории, чем в случае задания нагружения в ПСК; напомним, что при проверке постулата изотропии все нагружения задавались в ПСК. Данный факт свидетельствует о нарушении в случае задания нагружения в ЛСК гипотезы локальной определимости В.С. Ленского и может являться подтверждением того, что нагружение и определение значений характеристик необходимо производить в терминах подвижной системы координат, квазитвердое движение которой является физически обоснованным.

Отдельное внимание стоит обратить на траекторию деформирования и ОПН в ЛСК, получаемые при заданном в ПСК процессе нагружения. Для примера рассмотрим процесс нагружения по траектории I_1 с двумя лучевыми участками и изломом на 90º. На рис. 4.14 представлены зависимости компонент вектора полных деформаций в ЛСК от интенсивности полных деформаций. Из представленных зависимостей видно, что уже на первом этапе нагружения траектория деформирования имеет размерность 3: значения компонент $Э_2$ и $Э_3$ достигает 8%. На втором этапе нагружения изменяются значения пяти компонент вектора **Э**: $Э_6$, $Э_3$, $Э_4$, $Э_1$ и $Э_2$, значения которых превысили 5%. Таким образом, траектория деформаций в ЛСК на протяжении первого этапа имеет размерность не выше 3, однако на втором этапе нагружения достигает размерности 5. Максимальное отклонение траектории от плоскости $Э_5Э_6$ составило порядка 0.13 при полных деформациях 1, что является довольно существенной величиной. Данные теоретические результаты свидетельствуют о том, что для реализации предписанной в ПСК траектории $I_1(I_2)$ в условиях натурного эксперимента необходимо реализовать деформирование в ЛСК по траектории, имеющей размерность 5, что в настоящее время не представляется возможным, поэтому для проверки представленных результатов необходима разработка принципиально новых методик эксперимента.

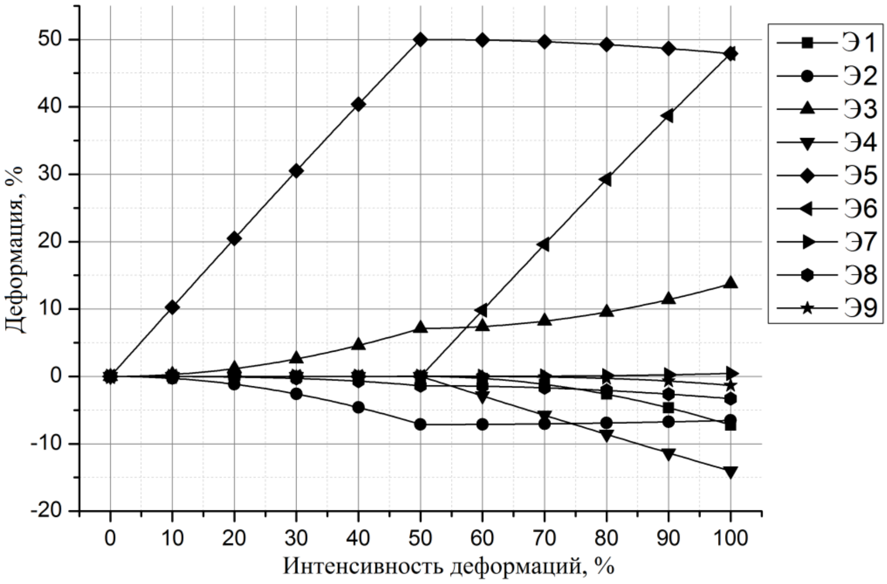

Рис. 4.14. Зависимости компонент вектора деформаций в ЛСК от интенсивности деформаций при задании процесса нагружения в ПСК

Ниже представлены результаты анализа образования текстуры в случае принятия различных гипотез о выделении квазитвердого движения. Стоит напомнить, что гипотеза Γ_W, подразумевающая разложение движение соответственно теореме Коши-Гельмгольца, является физически необоснованной для поликристаллических тел по ряду причин (раздел 3.3). В связи с этим в случае принятия различных гипотез эволюция внутренней структуры материала протекает различным образом: в случае гипотезы Γ_Ω происходит образование текстуры, что приводит к возникновению анизотропии и менее точному выполнению постулата изотропии, в случае гипотезы Γ_W образование текстуры не происходит, и материал на протяжении всего процесса остается изотропным. На рис. 4.15 изображены траектории движения выделенного направления [100] с течением процесса деформирования для 6 случайных кристаллитов из представительного объема.

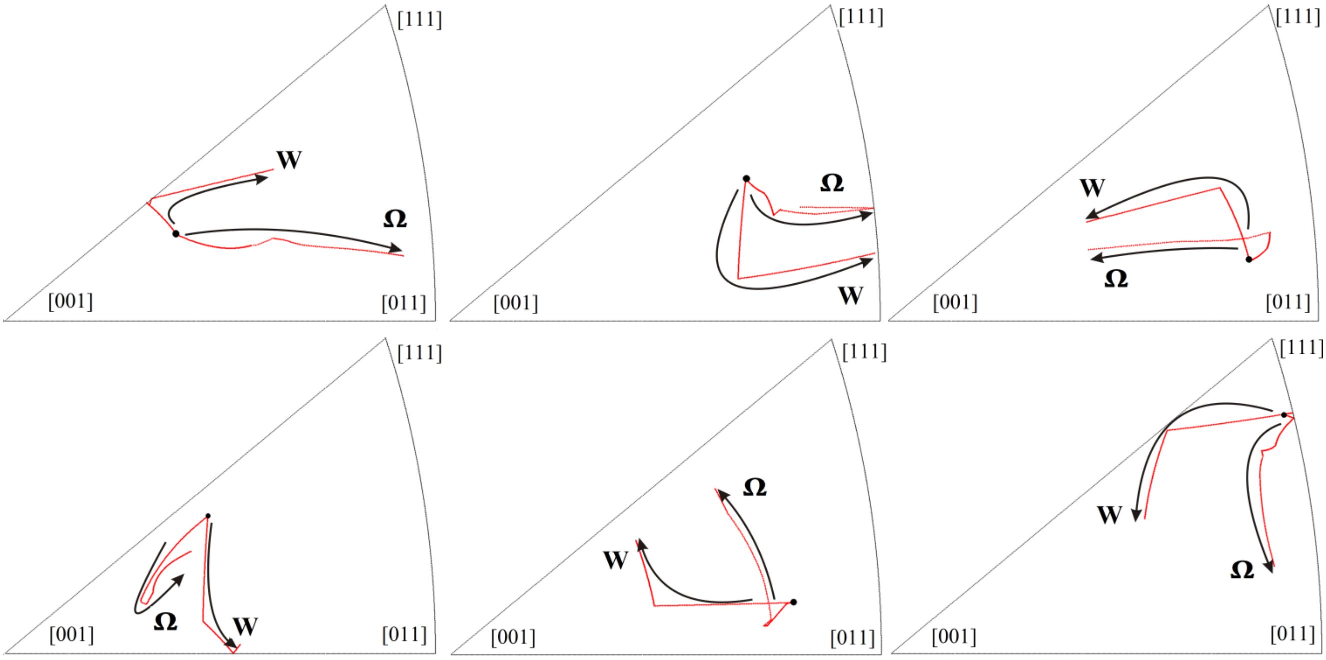

Рис. 4.15. Траектории движения направления [100] различных кристаллитов в случае принятия гипотез Γ_Ω и Γ_W (обозначения **W** и **Ω** соответственно) для процесса I_1. Стрелками указаны направления движения, точками – начальные положения

На рис. 4.15 на стандартном треугольнике для кубической решетки изображены траектории движения направления [100] различных кристаллитов из представительного объема Ст45, имеющих ОЦК решетку. Из представленных результатов видно, что траектории движения выделенного направления кристаллита существенным образом зависят от выбора гипотезы о разложении движения. Общей чертой в случае принятия гипотезы Γ_W для всех кристаллитов является прямолинейность участков траектории движения вектора, связанного с выделенным кристаллографическим направлением. Изломы данных траекторий соответствуют излому траектории деформаций. В случае принятия гипотезы Γ_Ω траектории движения на стандартном треугольники имеют более сложный характер. Стоит отметить, что схожая ситуация наблюдается для направлений [011] и [111]. Различный характер квазитвердого движения отдельных кристаллитов в случае принятия гипотез Γ_Ω и Γ_W в конечном счете влияет на эволюцию текстуры материала в целом. Стоит отметить, что в случае разложения движения соответственно теореме Коши-Гельмгольца и использования условий согласования масштабных уровней все кристаллиты испытывают одинаковое квазитвердое движение – спин вращения $ПСК_K$ всех кристаллитов в точности равен вихрю **W**. Таким образом, весь представительный объем и входящие в него кристаллиты испытывают жесткий поворот как одно целое. В связи с этим начальные ориентации кристаллитов в представительном объеме в начальный момент времени и ориентации в произвольный момент времени отличаются на одно и то же ортогональное преобразование, что показано и в численных расчетах. В рассматриваемых примерах в отсчетной конфигурации принят равномерный закон распределения ориентаций, т.е. плотность распределения в каждой области полюсной фигуры приблизительно равна, поэтому в произвольный момент времени для гипотезы Γ_W распределение ориентаций будет также равномерным. Из сказанного следует вывод о том, что в случае принятия гипотезы Γ_W не имеет место образование текстуры при равномерном начальном распределении ориентаций. В случае наличия начальной текстуры, полюсные фигуры будут также отличаться на ортогональное преобразование. Стоит отметить, что в случае использования гипотезы Γ_Ω распределение ориентаций претерпевает существенные изменения по сравнению с начальным, что подтверждается многочисленными экспериментальными данными. При этом текстура, как известно, оказывает существенное влияние на физико-механические макроскопические свойства материала.

Ниже приведены полюсные фигуры после деформирования по одинаковым траекториям (с точки зрения наблюдателя в ПСК и ЛСК соответственно) и использовании гипотезы Γ_Ω, но заданным в терминах ПСК и ЛСК соответственно:

$$\text{вдоль } \bar{Э}_4, Э_s \in 0, 0.5 \rightarrow \text{вдоль } \bar{Э}_5, Э_s \in 0.5, 1, \qquad (4.27)$$

$$\text{вдоль } Э_4, Э_s \in 0, 0.5 \rightarrow \text{вдоль } Э_5, Э_s \in 0.5, 1. \qquad (4.28)$$

Данные процессы нагружения взяты в качестве примера того, как может отличаться текстура материала при задании нагружения в терминах подвижного и неподвижного наблюдателя. Как следует из представленных выше результатов (рис. 4.14), траектории деформаций в лабораторной СК для данных процессов нагружения будут иметь существенные отличия. На рис. 4.16 представлены полюсные фигуры (проекции на плоскость Ox^2x^3 ЛСК) для трех кристаллографических направлений при реализации процессов в ПСК (верхний ряд) и ЛСК (нижний ряд) в случае принятия гипотезы Γ_Ω. Построение полюсных фигур производилось получением точек стереографических проекций выделенных направлений кристаллитов с последующим вычислением плотностей.

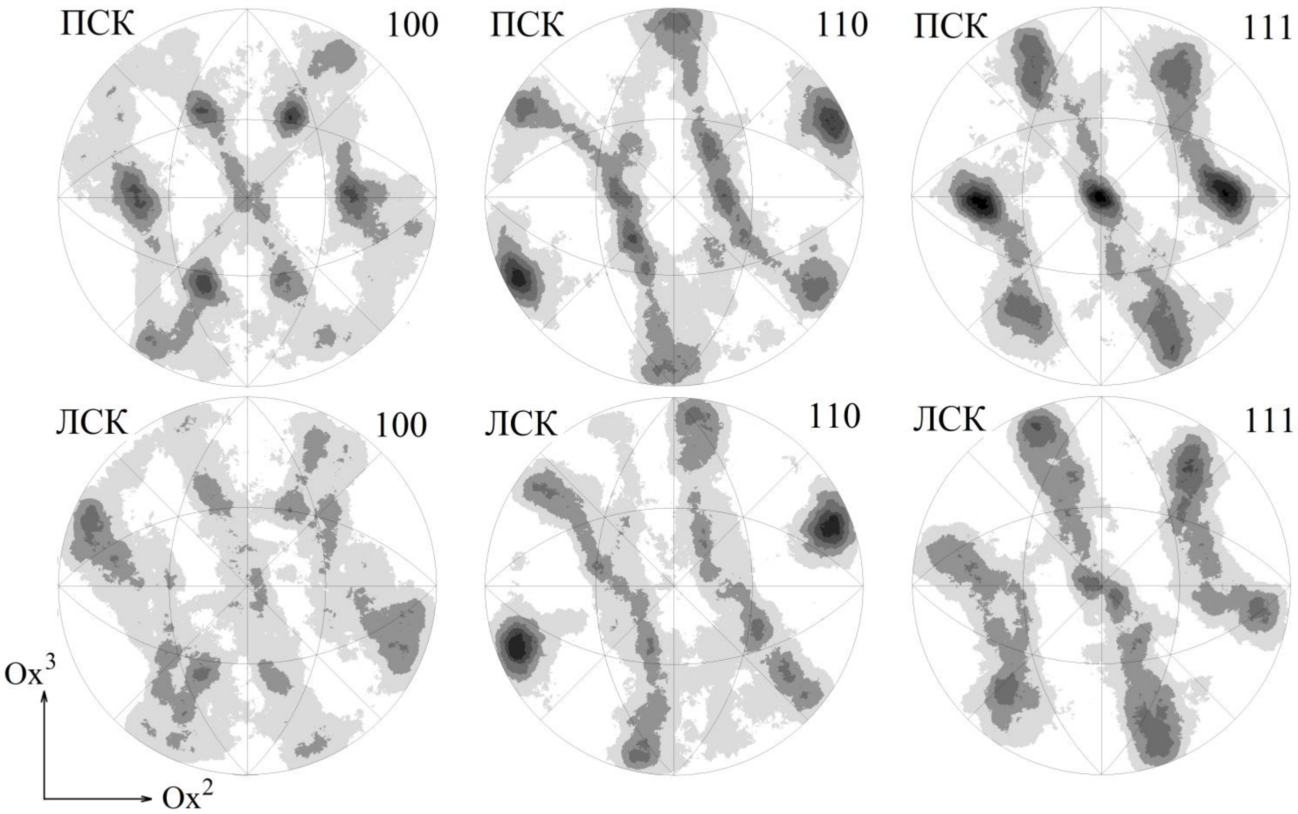

Рис. 4.16. Полюсные фигуры (проекция на плоскость Ox^2x^3) после нагружения по траектории в ПСК (4.27) (верхний ряд) и в ЛСК (4.28) (нижний ряд)

Общей чертой полюсных фигур, построенных для процесса в ПСК, является их более высокая контрастность в сравнении с соответствующими фигурами для процесса в ЛСК. Так, для кристаллографических направлений [111] для процесса, заданного в ПСК, имеют место три области сгущения плотности, расположенных на оси Ox^2, чего не наблюдается для процесса в ЛСК. Полюсные фигуры для направлений [100]в случае нагружения по траектории, заданной в ПСК, также имеют области с более высокой плотностью, чем для процесса, заданного в ЛСК. Данные результаты свидетельствуют о различии текстуры, равно как внутренней структуры материала, при реализации одинаковых траекторий в терминах подвижного и неподвижного наблюдателей, при этом квазитвердое движение первого определяется эволюцией микроструктуры материала. В связи с различием текстуры возникает различный характер анизотропии свойств материала, что приводит, как показано выше, к различным ОПН при задании процесса в ЛСК и ПСК; в случае реализации нагружения в ЛСК происходит более существенное отклонение вектора напряжений от плоскости траектории.

В данном параграфе показано, что постулат изотропии А.А. Ильюшина в случае больших градиентов перемещений выполняется с большей точностью в случае принятия гипотезы Γ_W, чем в случае Γ_Ω. Это вызвано образованием текстуры на первом этапе (до излома траектории) нагружения, что приводит к анизотропии механических свойств представительного макрообъема. В связи с этим на втором этапе нагружения отклик материала зависит от направления деформирования. Также показано, что при реализации нагружения по траектории, заданной в терминах ПСК, траектория в лабораторной системе координат (ЛСК), в которой происходит непосредственное нагружение на испытательной установке, существенно отличается от заданной в ПСК как внутренней геометрией, так и размерностью пространства, в которое она вложена (рис. 4.14). В связи с этим выявлены сложности реализации произвольной траектории нагружения, заданной в терминах ПСК, предложены пути возможного решения.

Заключение

В настоящей работе приведен обзор существующих экспериментальных работ по сложному нагружению и отмечено, что максимальные достигаемые в экспериментах накопленные деформации в случае нагружения по произвольным траекториям не превышают 5%. В связи с этим сделан вывод о необходимости теоретического описания неупругого деформирования поликристаллических материалов при больших градиентах перемещений по произвольным траекториям деформаций. Анализ существующих макрофеноменологических моделей для описания неупругого деформирования материала по сложным траекториям привел к выводу, что существующие модели малопригодны для описания процессов сложного нагружения при интенсивных деформациях ввиду отсутствия учета внутренней структуры материала.

В качестве математического аппарата для описания процессов сложного нагружения была модифицирована и применена двухуровневая конститутивная модель, основанная на физической теории упруговязкопластичности. При этом данная модель лишена ряда недостатков, которыми обладают другие модели, призванные описывать данные процессы. К указанным недостаткам относятся: симметризация меры деформации, приводящая к сдвигам по несуществующим системам скольжения, отсутствие привязки к кристаллической решетке при описании квазитвердого вращения элементов мезоуровня (кристаллитов), несогласованность определяющих соотношений различных уровней. Отдельным недостатком подавляющего большинства конститутивных моделей является отсутствие ясного физического смысла вводимой неголономной меры деформированного состояния, получаемой коротационным интегрированием симметричной составляющей градиента скорости перемещений **D**. Также отмечается отсутствие в большинстве работ физического обоснования введения той или иной коротационной производной в определяющем соотношении макроуровня, равно как обоснования разложения движения. При этом в качестве основной гипотезы о разложении используется следствие из теоремы Коши-Гельмгольца – квазитвердое движение на макроуровне описывается вихрем **W**. Показано, что данная гипотеза не имеет должного физического обоснования при рассмотрении процессов нагружения в случае больших градиентов перемещений.

В настоящей работе предлагается модификация существующей конститутивной двухуровневой модели, в которой устранены указанные недостатки. В рамках представленной модели дано физическое обоснование разложения движения на мезоуровне, квазитвердое движение в которой считается связанным с кристаллической решеткой. В случае использования данного разложения и определяющего соотношения в виде анизотропного закона Гука в скоростной форме было показано, что вводимые коротационные производные для мер напряженного и деформированного состояния должны быть одинаковыми. Описание квазитвердого движения на макроуровне вводится посредством согласования определяющих соотношений соседних масштабных уровней, при этом спин квазитвердого движения представительного макрообъема $\mathbf{\Omega}$ определяется средним значением спинов элементов мезоуровня $\boldsymbol{\omega}$. На обоих масштабных уровнях вводится подвижная система координат (ПСК), движение которой описывает квазитвердое вращение рассматриваемого элемента. Показано, что ввиду возникновения существенного квазитвердого вращения в случае интенсивных деформаций задание нагружения и определение компонент тензорных характеристик материала необходимо производить в терминах ПСК. Отмечается, что в реальных экспериментах нагружение производится в терминах неподвижного наблюдателя в лабораторной системе координат (ЛСК), в связи с чем был разработан алгоритм нахождения траектории в ЛСК для реализации произвольной предписанной в ПСК траектории деформаций.

Произведен ряд численных экспериментов по оценке точности выполнения постулата изотропии А.А. Ильюшина для двух- и трехмерных траекторий с лучевыми и криволинейными участками. Для данных траекторий были получены удовлетворительные оценки точности выполнения постулата изотропии для всех рассмотренных траекторий. При этом в случае использования гипотезы Γ_Ω было получено менее точное выполнение постулата изотропии, что, как показано, вызвано формированием текстуры в ходе нагружения и появлением анизотропных механических свойств. Отмечается, что получаемая в ЛСК траектория деформаций имеет размерность 5 при деформировании в ПСК по двухмерной траектории. В связи с этим возникает задача разработки новых методик постановки эксперимента с целью реализации в ЛСК траекторий, задаваемых с точки зрения наблюдателя в ПСК.

Построенная конститутивная двухуровневая модель позволяет описывать нагружение представительного объема поликристаллического материала по произвольным траекториям деформаций в случае больших градиентов перемещений как в терминах неподвижной лабораторной системы координат, так и в терминах подвижного наблюдателя. Данная модель также позволяет описывать состояние и эволюцию внутренней структуры материала, в том числе – формирование текстуры, а также определять физико-механические характеристики представительного объема материала. В связи с этим построенная модель может быть использована как в теоретических исследованиях нагружения для случая больших градиентов перемещений, так и при решении практических задач исследования напряженно-деформированного состояния деталей и конструкций при интенсивных пластических деформациях.

Список литературы

1. Андреев Л.С. О проверке законов пластичности в пространстве напряжений // Инж. журнал. МТТ. – 1966. – № 2.– С. 97-102.
2. Андреев Л.С. О проверке постулата изотропии // Прикладная механика. –1969. – Т. 15, № 7. –С. 122-125.
3. Аннин Б.Д., Жигалкин В.М. Поведение материалов в условиях сложного нагружения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – 1999. – 342с.
4. Артемьева А. А., Баженов В. Г., Казаков Д. А., Кибец А. И., Нагорных Е. В., О больших деформациях и предельных состояниях упругопластических оболочек вращения при комбинированных сложных нагружениях // Прикладная математика и механика. – 2015. – Т. 79, № 3. – С. 1-14.
5. Бакхауз Г. Анизотропия упрочнения. Теория в сопоставлении с экспериментом // Известия АН СССР. Механика твердого тела. –1976. – №6. – С. 120-129.
6. Богатырев И.С., Ильюшин А.А., Ленский В.С., Панферов В.М. Машина СН для исследования пластического деформирования металлов при сложном нагружении// Инженерный журнал. –1961. –№2. –С. 150-163.
7. Васин Р.А. Некоторые вопросы связи напряжений и деформаций при сложном нагружении // Упругость и неупругость. – 1974. – Вып. 1. – С. 59-126.
8. Васин Р.А. Свойства функционалов пластичности у металлов, определяемые в экспериментах на двузвенных траекториях деформации // В сб.: Упругость и неупругость. – М.: МГУ. – 1987. – С.115-127.
9. Вишняков Я.Д., Бабарэко А.А., Владимиров С.Л., Эгиз И.В. Теория образования текстур в металлах и сплавах. – М.: Наука. – 1979. – 344 с.
10. Волегов П.С., Янц А.Ю. Расчет напряженно-деформированного состояния представительного объема ГЦК–поликристалла. – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2011611840 от 28.02.2011.
11. Вулих Б.З. Введение в функциональный анализ. – М.: Наука. – 1967. – 416 с.
12. Генки Г. К теории пластических деформаций и вызываемых ими в материале остаточных напряжений. // Теория пластичности Сборник статей. – М.: ИЛ, 1948. – С. 117-135.

13. Генки Г. К теории пластических деформаций и вызываемых ими в материале остаточных напряжений// Теория пластичности. Сборник статей. – М.: ИЛ. – 1948. – С. 114-135.
14. Гультяев В.И. Закономерности пластического деформирования конструкционных материалов при сложном нагружении: диссертация на соискание ученой степени д-ра техн. наук. – Тверской гос. техн. ун-т, Тверь. – 2012. – 381 с.
15. Гультяев В.И. Сложное нагружение и разгружение конструкционных материалов типа стали Ст-45 в условиях нормальных температур // Машиностроение: сетевой электронный научный журнал. – 2015. – Т. 3,№3. – С.47-49.
16. Гультяев В.И. Экспериментальное исследование процессов сложного деформирования материалов на многозвенных траекториях// Межвуз. сборник «Проблемы прочности и пластичности», Нижний Новгород: Изд-во ННГУ. – 2007. – № 67. – С.95-98.
17. Дао Зуй Бик. О гипотезе локальной определимости в теории пластичности // Вестн. МГУ Сер. Математика и механика. – 1965. – № 2. – С. 67-75.
18. Дегтярев В.П. Пластичность и ползучесть машиностроительных конструкций.– М.: Машиностроение. –1967. – 130 с.
19. Елсуфьев С.А. Экспериментальная проверка постулата изотропии и закона пластичности. // В кн.: Гидротехника. – Л.: Ленинград. политех. ин-т. 1964.– С. 25-31.
20. Жуков А.М. Некоторые особенности поведения металлов при упруго-пластическом деформировании // Вопросы теории пластичности. – М.: Изд-во АН СССР. – 1961. – С. 30-57.
21. Жуков А.М. Сложное нагружение в теории пластичности изотропных материалов // Изв. АН СССР. Механ. и машиностр. – 1955. – №8. – С. 81-92.
22. Зубчанинов В.Г. Основы теории упругости и пластичности: Учебн. для машиностроит. спец. вузов. – М.: Высш. шк. – 1990. – 368 с.
23. Зубчанинов В. Г. Механика процессов пластических сред. М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2010. – 352с.

24. Зубчанинов В. Г., Алексеев А.А., Гультяев В.И. Исследование эффекта Баушингера и границы текучести при упругопластическом деформировании металлов // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2013. – С. 94-105.

25. Ильюшин А.А. О связи между напряжениями и малыми деформациями в механике сплошных сред // Прикладная математика и механика, Институт механики Академии наук СССР. – 1954. – Т. XVIII, вып. 6. – С. 641-666.

26. Ильюшин А.А. Пластичность. Основы общей математической теории. − М.: Изд. АН СССР. – 1963. – 272 с.

27. Ишлинский А.Ю. Общая теория пластичности с линейным упрочнением // Украинский математический журнал. –1954. – Т. 6. – С. 430-441.

28. Кадашевич Ю.И., Помыткин СП. О взаимосвязи теории пластичности, учитывающей микронапряжения, с эндохронной теорией пластичности // Известия РАН. Механика твердого тела. –1997. – №4. – С. 99-105.

29. Коларов Д., Балтов А., Бончева Н. Механика пластических сред. – М.: Мир. – 1979. – 302 с.

30. Кондратьев Н.С., Трусов П.В. Математическая модель для описания деформирования ОЦК-монокристаллов, учитывающая двойникование // Вычислительная механика сплошных сред. – 2011. Т. 4, №4. – С. 20-33.

31. Коровин И.М. Некоторые вопросы пластичности материала при нагружении с точкой излома // Механика твердого тела. –1969. – № 3. – С. 138-146.

32. Коровин И.М. Экспериментальное определение зависимости напряжения–деформация при сложном нагружении с одной точкой излома // Инж. журн., 1964. – № 4, вып. 3. – С. 592-600.

33. Ленский В.С. Гипотеза локальной определимости в теории пластичности // Изв. АН СССР. ОТН. Механика и математика. – 1962. – №5. – С. 154-159.

34. Ленский В.С. Экспериментальная проверка законов изотропии и запаздывания при сложном нагружении // Изв. АН СССР. ОТН. –1958. – С. 15-24.

35. Ленский В.С. Экспериментальная проверка основных постулатов общей теории упруго-пластических деформаций. // В. кн.: Вопросы теории пластичности. М.: АН СССР.–1961. – С. 58-82.

36. Ленский В.С., Машков И.Д. Проверка законов пластичности в трехмерном пространстве девиатора деформаций // Упругость и неупругость. М.: МГУ. – 1971. – Вып. 2. – С. 158-167.
37. Линь Т.Г. Физическая теория пластичности // Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. – М.: Мир – 1976. – Вып.7. – С.7-68.
38. Лурье А.И. Нелинейная теория упругости. М.: Наука. – 1980.– 512 с.
39. Лурье А.И. Теория упругости. М.: Наука. – 1970. – 490 с.
40. Максак В.И., Г.А. Дощинский Пластическая деформация меди и дюралюминия при сложном нагружении // Известия Томского ордена трудового красного знамени политехнического института им. С.М. Кирова. – 1970. – т. 157. – С. 35-37.
41. Малый В.И. О подобии векторных свойств материалов в упругопластических процессах // Прикл. мех.–1978. – т. 14, № 1. – С.21-27.
42. Малый В.И. Разложение функционала напряжений по малому параметру // Вестн. Моск. ун-та. Матем., механ.–1967. – № 2. – С.73-80.
43. Маркин А.А., Соколова М.Ю. Нелинейные соотношения анизотропной упругости и частный постулат изотропии // Прикладная математика и механика. – Т. 71. – №4. – 2007. – С. 587-594.
44. Мизес Р. Механика твердых тел в пластически деформированном состоянии // Теория пластичности. Сборник статей. – М: ИЛ. 1948. – С. 57-69.
45. Мищенко А.С., Фоменко А.Т. Краткий курс дифференциальной геометрии и топологии. – М.: Физматлит. – 2004. – 304 с.
46. Мосолов А.Б. Эндохронная теория пластичности. Препринт. – М.: Институт проблем механики АН СССР. – 1988. – 44 с.
47. Надаи А. Пластичность и разрушение твердых тел. М.:ИЛ. – 1954. – 648 с.
48. Надаи А. Пластичность. Объединенное научно-техническое издательство НКТП СССР. Главная редакция общетехнической литературы.–1936. – 280 с.
49. Новожилов В.В. , Кадашевич Ю.И. Микро напряжения в конструкционных материалах. Л.: Машиностроение. – 1990. – 223 с.
50. Новожилов В.В. Теория упругости. – Л.: Судпромгиз. – 1958. – 374 с.

51. Новокшанов Р.С., Роговой А.А. Эволюционные определяющие соотношения для конечных вязкоупругих деформаций // Известия РАН. Механика твердого тела. – 2005. № 4. – С. 122-140.
52. Орлов А.Н. Введение в теорию дефектов в кристаллах // М.: Высшая школа. – 1983.– 144 с.
53. Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука. –1986. – 232 с.
54. Прагер В. Введение в механику сплошных сред. – М.: Изд-во иностранной литературы. –1963. –312 с.
55. Работнов Ю.Н. Ползучесть элементов конструкций. – М.: Наука. – 1966.– 752 с.
56. Работнов Ю.Н. Сопротивление материалов. – М.: Физматгиз. – 1962.– 456 с.
57. Роговой А.А. Кинематика и термодинамика упруго-неупругого процесса при конечных деформациях // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. – Пермь: ИМСС Уро РАН. – 2008. № 7. – С 1-8.
58. Роговой А.А. Определяющие соотношения для конечных упруго-неупругих деформаций // Прикладная механика и техническая физика. – Новосибирск: СО РАН. – 2005. – Т 46. № 5 (273). – С 138-149.
59. Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. – М.: Металлургия.–1986. – 224 с.
60. Седов Л.И. Механика сплошной среды. Т. 1. –М.: Наука. – 1970. – 492 с.
61. Старжинский В.М. Теоретическая механика.– М.: Наука. – 1980. – 464с.
62. Тарг С. М. Краткий курс теоретической механики: Учеб. для втузов. 10-е изд., перераб. и доп.–М.: Высш. шк.–1986.– 416 с.
63. Трусделл К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред. М.: Мир. –1975.– 592 с.
64. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории упругопластичности // Физическая мезомеханика. – 2010. –Т. 13, № 3. – С. 21-30.

65. Трусов П.В., Волегов П.С. Определяющие соотношения с внутренними переменными и их применение для описания упрочнения в монокристаллах // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2009. – Т. 12, № 5. – С. 65-72.
66. Трусов П.В., Волегов П.С, Янц А.Ю. Описание внутризеренного и зернограничного упрочнения моно- и поликристаллов // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – СПб. – 2010. – № 2 (98). – С. 110-119.
67. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к оценке справедливости постулата изотропии Ильюшина в случае больших градиентов перемещений // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2015. – Т. 18, №1. –С. 23-37.
68. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю. Несимметричная физическая теория пластичности для описания эволюции микроструктуры поликристаллов // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2011. – Т. 14, №1. – С. 19-31.
69. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю., Двухуровневые модели поликристаллов: о независимости образа процесса нагружения представительного макрообъема // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН, 2013. – Т. 16, №6. – С. 33-41.
70. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю., Двухуровневые модели поликристаллов: приложение к анализу сложного нагружения // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН, 2013. – Т. 16, №6. – С. 43-50.
71. Трусов П.В., Волегов П.С., Янц А.Ю., Двухуровневые модели поликристаллов: о разложении движения на макроуровне // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН, 2013. – Т. 16, №5. – С. 17-23.
72. Трусов П.В., Келлер И.Э. Теория определяющих соотношений. Часть I. Общая теория. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та. – 1997. – 101 с.
73. Трусов П.В., Нечаева Е.С., Швейкин А.И. Применение несимметричных мер напряженного и деформированного состояния при построении многоуровневых конститутивных моделей материалов // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2013. – Т. 16, №2. – С. 15-31.

74. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели// Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2011. – Т.14, №4. – С. 17-28.
75. Трусов П.В., Швейкин А.И., Нечаева Е.С., Волегов П.С. Многоуровневые модели неупругого деформирования материалов и их применение для описания эволюции внутренней структуры // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2012. – Т. 15, №1. – С. 33-56.
76. Трусов П.В., Янц А.Ю. О физическом смысле неголономной меры деформации // Физическая мезомеханика. – Томск: ИФПМ СО РАН. – 2015. – Т. 18, №2. – С. 13-21.
77. Хилл Р. Математическая теория пластичности. Гостехиздат. – 1950. – 407 с.
78. Хилл Р. О проблеме единственности в теории жестко-пластического тела // В кн.: Механика. Сб. перев. –1958. – № I (47). – С. 77-86.
79. Хирт Дж., Лоте И. Теория дислокаций. – М.: Атомиздат. – 1972. – 599 с.
80. Хоникомб Р. Пластическая деформация металлов. – М.: Мир. – 1972. – 408 с.
81. Циглер Г. Видоизменение закона упрочнения, предложенного Прагером // Механика: сб. переводов. –1960. – № 3. – С. 35-95.
82. Янц А.Ю., Волегов П.С. Несимметричная физическая теория пластичности ГЦК-поликристаллов: проблемы определения скоростей сдвигов в системах скольжения при использовании вязких соотношений // Вестник ПНИПУ. Прикладная математика и механика. – 2011. – №9. – С. 200-211.
83. Янц А.Ю., Волегов П.С., Трусов П.В. Расчет образов процесса нагружения ГЦК-поликристаллов по произвольным траекториям ("Расчет ОП ГЦК"). – Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2013619701 от 14.10.2013.
84. Asaro R.J. Micromechanics of crystals and polycrystals // Advances in Applied Mechanics. – 1983. – V. 23. – Pp. 1-115.
85. AsaroR.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // Acta Metall. Mater.– 1985. V. 33. – Pp. 923-953.
86. Backhaus G. Zur Analytischen Erfassung des Allgemeinen Bauschinger effektes // Acta Mechanics. – 1972. – Vol.14, N.1. – S.31-42.

87. Balasubramanian S., Anand L. Elasto-viscoplastic constitutive equations for polycrystalline fcc materials at low homologous temperatures // J. Mech. and Phys. Solids. – 2002. – V. 50. – Pp. 101-126.
88. Batra R.C., Zhu Z.G. Effect of loading direction and initial imperfections on the development of dynamic shear bands in a FCC single crystal // ActaMechanica. – 1995. –V. 113, N. 1-4. – Pp. 185-203.
89. Bazant Z.P., Shieh C.Z. Endochronic model for nonlinear triaxial deformations of concrete//Nuclear Engineering and Design. – 1978. – V. 47, No. 4. –Pp. 598-619.
90. Berveiller M. and Zaoui A. An extension of the self-consistent scheme to plastically flowing polycrystals // J. Mech. Phys. Solids. – 1979. – V. 26. – Pp. 325-339.
91. Bilby B.A., Gardner L.R.T., Stroh AN. Continuous distributions of dislocations and the theory of plasticity // In: Proc. 9th Int. Congr. Appl. Mech. Bruxelles, 1956. – Universiterde Bruxelles. – 1957. – V. 8. – Pp. 35-44.
92. Bishop J.F., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycristalline face - centered metal// Phil. Mag. Ser.7. – 1951. –V. 42, N. 334. – Pp. 1298-1307.
93. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycristalline aggregate under combined stresses// Phil. Mag. Ser.7. – 1951. – V. 42, N. 327. – Pp. 414-427.
94. Borodii M. V., Stryzhalo V. O., Kucher M. K., Danyl'chuk E. L., and Adamchuk M. P. An experimental study of ratcheting effect under multiaxial proportional loading // Strength of Materials.–2014. –V. 46. No. 1. –Pp. 97-104.
95. Clayton J.D., McDowell D.L. A multiscale multiplicative decomposition for elastoplasticity of polycrystals // International Journal of Plasticity. – 2003. –V. 19.–Pp. 1401-1444.
96. Cotter B.A. and Rivlin R. S. Tensors associated with time-dependent stress// Q. Appl. Math. – 1955. – V.13. – Pp.177-182.
97. Devincre B., Kubin L., Hoc T. Physical analyses of crystal plasticity by DD simulations //Scripta Mater. –2006. – V. 54. – Pp. 741-746.
98. Dienes J.K. On the analysis of rotation and stress rate in deforming bodies// Acta Mech. – 1979. – V.32. – Pp. 217-232.
99. Dietrich L. and Socha G. Accumulation of Damage in A336 GR5 Structural Steel Subject to Complex Stress Loading // Strain. – 2012. – N. 48. – Pp. 279-285.

100. Fajoui J., Gloaguen D., Courant B., Guillén R. Micromechanical modelling of the elastoplastic behavior of metallic material under strain-path changes // Comput. Mech. – 2009. – V. 44. – Pp. 285-296.

101. Fivel M. Discrete dislocation dynamics: an important recent break-through in the modelling of dislocation collective behaviour // Comptesrendus physique. – 2008. – V. 9. – Pp. 427-436.

102. Fivel M., Tabourot L., Rauch E., Canova G. Identification through mesoscopic simulations of macroscopic parameters of physically based constitutive equations for the plastic behaviour of fcc single crystals // J. Phys. IV (Proc.). –1998. – V. 8. – Pp. 249-258.

103. Franciosi P. The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals// Acta Metall. –1985. – V. 33. – Pp. 1601-1612.

104. Franciosi P., Berveiller M., Zaoui A. Latent hardening in copper and aluminium single crystals //Acta Metall. –1980, – V. 28, N. 3. – Pp. 273-283.

105. Franz G., Abed-Meraim F., Ben Zineb T. Strain localization analysis using a multiscale model //Computational Materials Science. – 2009. – V. 45. – Pp. 768-773.

106. Gérard C, Bacroix B., Bornert M., Cailletaud G., Crépin J., Leclercq S. Hardening description for FCC materials under complex loading paths // Comput. Mater. Sci.– 2009. – V. 45. – Pp. 751-755.

107. Gérard C., Cailletaud G., Bacroix B. Modeling of latent hardening produced by complex loading paths in FCC alloys // International Journal of Plasticity. – 2013. – V. 42. – Pp. 194-212.

108. Green A.E., Naghdi P.M. A general theory of an elastic-plastic continuum// Arch. Ration. Mech. Analysis. – 1965. – V.18. – Pp.251-281.

109. Groh S., Marin E.B., Horstemeyer M.F., Zbib H.M. Multiscale modeling of the plasticity in an aluminum single crystal // International Journal of Plasticity. – 2009. – V. 25. – Pp. 1456-1473.

110. Handelman G., Lin C.C. and Prager W. On the mechanical behavior of metals in the strain-hardening range // Quart. Appl. Math. – 1947. – Pp. 397-407.

111. Hill R., Wills H. H. On the state of stress in a plasticrigid body at the yield point // The Philosophical magazine. Seventh series. – 1951. – V. 42, N 331. – Pp. 868-875.

112. Hohenemser K. and Prager W. Über die Ansätze der Mechanik isotroper Kontinua // Z. Angew. Math. Mech. – 1932. – V. 12. – Pp. 216-226.
113. Jaumann G. Geschlossenes System physikalischer und chemischer Differentialgesetze// Sitzber. Akad. Wiss. Wien, Abt. IIa. –1911. – B.120. – S.385-530.
114. Kalidindi S.R., Bronkhorst C.A., Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals// J. Mech. Phys. Solids. – 1992. – V. 40, N. 3. – Pp. 537-569.
115. Kratochvil J., Tokuda M. Plastic response of polycrystalline metals subjected to complex deformation history // Trans. ASME. J. Engng. Mater. Technol. – 1984. – V. 106. – Pp. 299-303.
116. Kröner E. Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen // Arch. Rational Mech. Anal. – 1960. – V. 4. – Pp. 273-334.
117. Kröner E.,Teodosiu C. Lattice defect approach to plasticity and viscoplasticity // Int. Symposium on Foundations of Plasticity (ed. A. Sawezuk), Groningen, The Netherlands: Noordhoff. – 1972. – Pp. 45-88.
118. Lebensohn R.A., Tomé C.N. A self-consistent anisotropic approach // Acta Metall. – 1993. – V. 41. – Pp. 2611-2624.
119. Lee E.H. Elastic plastic deformation at finite strain // ASME J. Appl. Mech. – 1969. – V. 36. – Pp. 1-6.
120. Lee E.H., Liu D.T. Elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis // J. Appl. Phys. – 1967. –V. 38. –Pp. 19-27.
121. Lehmann T. Anisotrope plastische Formänderungen// Romanian J. Techn. Sci. Appl. Mech. – 1972. – V.17. – Pp.1077-1086.
122. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face-centered cubic crystal // J. Mech. Phys. Solids. – 1957. –V. 5, N. 1. – Pp.143-149.
123. M’Guil S., Ahzi1 S., Khaleel MA. An intermediate viscoplastic model for deformation texture evolution in polycrystals // Proceed. ICOTOM 14. Leuven. – Belgium. – 2005. – Pp. 989-994.
124. Madec R., Devincre B., Kubin L., Hoc T., Rodney D. The role of collinear interaction in dislocation-induced hardening// Science. – 2003. – V. 301. – Pp. 1879-1882.
125. Masima M. und Sachs G.O. Mechanische Eigenschaften von Messingkristallen // Z. Physik. – 1928. – V. 50. – Pp. 161-186.

126. Mroz Z. On the description of anisotropic work – hardening // J. Mech. Phys. Solids. – 1967. – V. 15, N. 3. – Pp. 163-175.

127. Nagtegaal J.C. and de Jong J. E. Some aspects of non-isotropic work hardening in finite strain plasticity // In: Plasticity of Metals at Finite Strain, Theory, Computation and Experiment, edited by E.H. Lee and R. L. Mallett: Stanford University, Stanford. – 1982. – Pp. 65-106.

128. Oldroyd J.G. On the formulation of rheological equations of state // Proc. R. Soc. Lond. – 1950. – V.A 200. – Pp.523-541.

129. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. // ActaMetallurgica. – 1983. – V. 31, N. 12. – Pp. 1951-1976.

130. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A., An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals // Acta Metallurgica. – 1982. – V. 30. – Pp. 1087-1119.

131. Prager W. Mechanique des solides isotropes au delà du domaine élastique // Memorial de Sciences Math.– 1937.–V. LXXXVII. – Pp. 59-64.

132. Prandtl L. Ein Gedankenmodell zur kinetischen Theorie der festen Körper // Zeits. Angew. Math. undMech. – 1928. – V. 8, N. 2. – Pp. 85-106.

133. Reuss E. Berücksichtigung der elastischen Formänderungen in der Plasizitätstheorie // Zeits. Angew. Math. und Mech. –1930.– V. 10.– Pp. 266-274.

134. Sachs G. Zur Ableitung einer Fliessbedingung // Z. Verein Deut. Ing. – 1928. – N.72. – Pp. 734-736.

135. Taylor G.I. Plastic strain in metals // J. Inst. Metals. – 1938. –V. 62. – Pp. 307-324.

136. Taylor G.I., Elam C.F. The distortion of an aluminium crystal during a tensile test // Proc. Roy. Soc. (London). – 1923. – Ser. A 102. – Pp. 643-647.

137. Taylor G.I., Elam C.F. The plastic extension and fracture of aluminum crystals // Proc. Roy. Soc. (London). – 1925. – Ser. A 108. – Pp. 28-51.

138. Tokuda M., Kratochvil J. Prediction of subsequent yield surface by a simple mechanical model of polycrystal // Arch. Mech. – 1984. –V. 36, N. 5-6. – Pp. 661-672.

139. Tokuda M., Kratochvil J., Ohashi Y. On mechanism of induced plastic anisotropy of polycrystalline metals // Bull. JSME. – 1982. –V. 25, N. 208. – Pp. 1491-1497.

140. Tokuda M., Kratochvil J., Ohno N. Inelastic behaviour of poly-crystalline metals under complex loading condition // International Journal of Plasticity. – 1985. – V. 1. – Pp. 141-150.
141. Trusov P.V., Volegov P.S., and Yanz A.Yu. Two-level models of polycrystalline elastoviscoplasticity: Complex loading under large deformations // Z. Angew. Math. Mech. – 2015.– V. 95, N. 10.– Pp. 1067–1080. // DOI 10.1002/zamm.201400153
142. Valanis K. C. A theory of viscoplasticity without a yield surfaces. Pt. I-II // Arch. Mech. Stosow. –1971. – V. 23, N. 4. – Pp. 517-551.
143. Valanis K.C., Read H.E. A new endochronic plasticity model for concrete //Mechanics of Materials. – 1986. –V. 5. – Pp. 277-295.
144. Vattré A., Devincre B., Feyel F., Gatti R., Groh S., Jamond O., Roos A. Modelling crystal plasticity by 3D dislocation dynamics and the finite element method: The Discrete-Continuous Model revisited //Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2014. V. 63. – Pp. 491-505.
145. Von Mises R. Mechanik der festen Koerper im plastish – deformablen zustand // Gottinger Nachrichten Mathematisch, Physikalishe Klasse. – 1913. – Pp. 204-218.
146. Weng G.J. Dislocation theories of work hardening and yield surfaces of single crystals // ActaMechanica. – 1980. – V. 37, N. 3-4. –Pp. 217-230.
147. Weng G.J. The yield surface of single crystals at arbitrary strain // ActaMechanica. – 1980. – V. 37, N. 3-4. – Pp. 231-245.
148. Wu H.C., Wang Z.K., Aboutorabi M.R. Endochronic modeling of sand in true triaxial test // Journal of Engineering Mechanics. – 1985. – V. 111, N. 10. – Pp. 1257-1276.
149. Zaremba S. Sur uneformeperfectionnée de la théorie de la relaxation // Bull. Int. Acad. Sci. Cracovie. – 1903. – Pp. 595–614.