МЕХАНИКА
ТВЕРДОГО ТЕЛА
№ 5 • 1999

УДК 539.375

© 1999 г. П.В. МАКАРОВ

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДЕФОРМАЦИИ И РАЗРУШЕНИЯ НА МЕЗОУРОВНЕ

В работе представлен новый, единый подход к задачам моделирования процессов деформации и разрушения материалов со сложной внутренней структурой на разных масштабных уровнях. Показано, что описание в рамках макроскопических феноменологических моделей оказывается явно недостаточным, особенно в тех случаях, когда существенными оказываются локальные значения параметров и неоднородность внутреннего строения. С позиций физической мезомеханики рассмотрены методические аспекты данной проблемы, особенности построения определяющих соотношений для описания пластических деформаций, учитывающих вклады в сопротивление течения с микро- и мезомасштабных уровней. Рассмотрена задача моделирования поведения представительного мезообъема материала, для которого явно введена в рассмотрение структурная неоднородность. Предложена простая модель, позволяющая интегрально учесть возможные повороты мезофрагментов (зерен, твердых включений и т.д.), обусловленные эволюцией внутренней микро- и мезоструктуры нагружаемого материала.

Отмечена ключевая роль мезоскопического масштабного уровня для анализа особенностей локализации деформаций и моделирования σ–ε при больших степенях пластических деформаций. Представлены результаты модельных расчетов и их анализ.

1. Введение. Существует ряд задач механики и физики деформируемого твердого тела, а также ряд материаловедческих проблем, которые не могут быть успешно решены в рамках традиционных подходов, развитых в этих областях.

Это прежде всего проблема конструирования новых материалов, деформация и разрушение материалов с различными покрытиями, связанные задачи прочности и изменения в процессе деформирования служебных характеристик функциональных материалов и материалов для электроники.

Все эти задачи объединяет то, что в процессе их решения, как задач механики, необходимо также рассматривать задачи эволюции их внутренней структуры, изменения связей между составляющими элементами, и их влияния на служебные и функциональные свойства материала.

Оказалось, что принципиальное значение при этом (особенно для решения проблемы прочности) играют внутренние границы раздела составляющих структурных элементов, а также различные физические процессы, которые развиваются в приграничных областях.

Таким образом, деформируемый материал под нагрузкой является сложной, как правило, иерархически организованной системой элементов разных масштабов [1–3].

Эта система эволюционирует в ходе нагружения и адаптируется к приложенным воздействиям, а элементы ее внутреннего строения – микроструктура – способна к самоорганизации.

Действительно, если материал или конструкция способны противостоять прило-

женным воздействиям, не разрушаясь и не теряя своих функциональных свойств, можно говорить, что материал, как система, адаптируется к внешним нагрузкам.

Традиционно анализ упругопластического деформирования нагружаемых материалов проводится с позиций континуальной механики. Такой подход позволяет моделировать деформацию и разрушение материалов в рамках макроскопического описания, используя в расчетах усредненные физико-механические параметры (предел текучести, предел прочности и т.д.). Эти параметры также имеют сугубо макроскопический смысл.

С другой стороны, накоплен очень большой экспериментальный материал по изучению эволюции внутренней микроструктуры нагруженных материалов, особенно металлов. Это позволило привлечь теорию дислокаций к анализу многих особенностей пластического деформирования и анализу таких явлений как деформационное упрочнение, формирование субструктур в процессе деформации, стадийность макроскопических кривых течения в связи с эволюцией внутренней микроструктуры и т.д.

Однако, привлечение только микроскопического анализа (когда пространственные масштабы неоднородностей внутреннего строения сравнимы с межатомными расстояниями или размерами отдельных дислокаций) оказалось явно недостаточным для построения полноценной теории, позволяющей связать макроскопическую деформацию с внутренним строением материала. В последние годы стало очевидным, что наше понимание элементарных актов деформации на микроуровне и, самое главное, их интерпретация при переходе к макроописанию оказались не вполне правильными и определялись неверной схемой деформирования [2–7]. Стала очевидной принципиальная невозможность непосредственного перехода от микроописания к макроскопической феноменологии.

Неверным, прежде всего, оказалось то, что макроскопическая пластическая деформация связывалась только с трансляционным движением деформационных дефектов – кристаллографическими сдвигами. В этом случае условие сохранения сплошности обеспечивается определенной самоорганизацией только трансляционных мод деформации. Действительно, все известные схемы пластической деформации кристаллов (Бишопа – Хилла, Тейлора, Закса, Кохендорфера) представляют собой различные комбинации кристаллографических сдвигов и вводят в рассмотрение, следовательно, только трансляции.

С другой стороны, многие эффекты пластичности, особенно при развитых степенях деформаций, не находят объяснений с позиций теории дислокаций. Это широко известные явления формирования и движения как целого объемных структурных элементов – деформационных доменов [8–10], формирование микро- мезо- и макрополос сдвига [11, 12], явления сбрасообразования и двойникования, развитие устойчивых сдвиговых полос при усталостном нагружении и т.д. Характерной особенностью деформации, при которой наблюдаются перечисленные явления, является высокая степень локализации, сопровождаемая поворотами кристаллографической решетки [8, 13]. На микроскопическом уровне процессы определяются уже не отдельными дислокациями, а корреляциями между дислокационными ансамблями. Корреляция в расположении дислокаций и при их движении оказываются очень велики [8, 14]. При таком коррелированном движении отдельные части кристаллов оказываются смещенными друг относительно друга на значительные, по сравнению с межатомными, расстояния, а весь кристалл оказывается разбитым на отдельные объемы мезоскопического масштаба.

Таким образом, только континуальное макроскопическое описание, даже с привлечением теории дислокаций, в принципе не способно описать реальные механизмы пластической деформации и разрушения без привлечения дополнительной информации. Такой необходимой информацией об исходном строении материала и эволюции под нагрузкой его внутренней структуры являются данные о поведении, например, отдельных зерен металлов, их взаимодействиях, данные о поведении

внутренних границ между различными структурными элементами, информация об образовании новых структурных элементов в ходе деформирования (возникновение ячеистой, полосовой, блочной и т.д. субструктур).

Все перечисленные примеры относятся к структурным элементам внутреннего строения, характерные масштабы которых существенно больше, чем, например, размер отдельной дислокации, но не являются макроскопическими. Макрочастица должна содержать в себе достаточно много подобных структурных элементов, чтобы было возможно континуальное феноменологическое описание в рамках механики сплошных сред.

Другими словами, в теорию должен быть введен промежуточный масштабный уровень рассмотрения, больший, чем микроскопический, но не являющийся макромасштабным, учитывающий реальное строение материала и, прежде всего, наличие внутренних границ и неоднородность физико-механических характеристик. Это – мезоуровень. Объектами изучения на мезоуровне будут уже дислокационные ансамбли и мезообъемы конечных размеров.

Существенным для понимания лидирующих механизмов пластического деформирования на развитых стадиях деформации и последующего разрушения на мезоуровне является то, что скоррелированное поведение дефектов на микроуровне приводит на мезо-, а также макроуровнях к сильной локализации деформации [1, 2, 8, 14]. Напрашивается вывод, что понятие сплошной среды, строго говоря, неприменимо к пластически деформированным телам. Другими словами, построение континуальной теории упругопластического тела, охватывающей весь спектр явлений пластичности, строго говоря, невозможно [14–16]. Действительно, пластическая деформация на микроуровне есть движение разрывов – дефектов структуры, которые при выходе на границы кристаллов образуют ступеньки. С самого начала пластической деформации идет процесс разрыхления кристаллов и накопления в них микронесплошностей различной физической природы. Этот процесс является своеобразной аккомодацией на микроуровне при активном нагружении кристаллов, способных к ограниченному формоизменению. С другой стороны, на мезоуровнях идет процесс образования мезофрагментов различных масштабов. Эти объемные структурные элементы оказываются слабо деформированными внутри по сравнению с областями локализованной деформации, которые их разделяют. Ведущими аккомодационными процессами на мезоуровне наряду с пластической деформацией мезообъемов являются также повороты этих объемных структурных элементов и накопление повреждений уже мезоскопических масштабов – мезотрещин, которые образуются, как показывает опыт [6, 8, 13, 17], на границах сформировавшихся фрагментов, часто следуя по пути полос локализованного сдвига. Выход этого процесса на макроуровень – формирование макрополос локализованной деформации и макротрещин означает глобальное разрушение объекта – глобальную потерю сдвиговой устойчивости объекта как целого.

Одной из главных причин существенно неоднородного развития процесса пластического деформирования на микро-, мезо- и макроуровнях являются неоднородности внутреннего строения материалов (как исходная неоднородность, так и приобретенная в ходе пластического деформирования), приводящие к возникновению микро- мезо- и макроконцентраторов напряжений. Другой причиной возникновения концентраторов напряжений является ограниченность формоизменения кристаллов на микро- и мезоуровнях [1–6, 8]. Физическая природа концентраторов напряжений различных масштабов и их роль в формировании неоднородной пластической деформации широко обсуждаются в литературе [1–6, 8].

Разномасштабная локализация деформации является неотъемлемой и наиболее характерной чертой пластически деформируемых тел еще и потому, что несмотря на обилие и большое разнообразие структурных дефектов различной физической природы, силы связи в твердых телах все же столь велики, что образец при нагружении не может потерять сдвиговую устойчивость сразу во всем сечении.

Потеря сдвиговой устойчивости в нагружаемых твердых тел реализуется как последовательный процесс локальной потери сдвиговой устойчивости на микро-, мезо- и макроуровнях: образование и движение дислокаций на микроскопическом уровне есть процесс локальной потери сдвиговой устойчивости кристаллической решеткой, локальная потеря сдвиговой устойчивости на мезоуровне – образование мезополос локализованной деформации и формирование блоков на мезоуровне и, наконец, образование шейки, как процесс глобальной потери сдвиговой устойчивости образцом в целом [4, 6].

Таким образом, пластическая деформация есть многостадийный многоуровневый процесс [1–6, 8]. Взаимодействие и различные корреляции многочисленных структурных элементов разных масштабов, как уже имеющихся в исходном материале, так и сформировавшихся в процессе пластического деформирования (субструктуры), приводят к огромному экспериментально наблюдаемому разнообразию свойств материалов от хрупкого поведения до сверхпластичности.

Несомненно, что различные комбинации сдвигов и поворотов на мезоуровне при разнообразных способах сложного нагружения и различных путях деформирования формируют соответствующую специфическую макроскопическую деформацию. Именно это обстоятельство не позволяет описать сложное нагружение, основываясь только на результатах опытов на простое нагружение (сдвиг и растяжение – сжатие), для которых реализуется иная комбинация сдвигов и поворотов, а следовательно, материал проявляет и другое сопротивление приложенной нагрузке.

Физическая мезомеханика материалов [1–8] как раз и базируется на перечисленных выше фактах, которые позволили сформулировать следующие основные положения этого подхода [1, 4, 6, 7]:

1. Деформируемое твердое тело есть многоуровневая, иерархически организованная система структурных элементов разных масштабов, в которой пластическая деформация развивается как самосогласованный процесс потери сдвиговой устойчивости на различных масштабных уровнях: микро, мезо и макро;

2. Элементарными носителями деформации на мезоуровне выступают объемные структурные элементы конечных размеров (зерна, субзерна, конгломераты зерен, дислокационные ячейки, твердые включения и т.д.). Схема их движения есть "сдвиг + поворот";

3. Ведущими механизмами, контролирующими деформацию на мезоуровне, являются процессы образования диссипативных субструктур и фрагментация деформируемого материала.

4. Внутренние границы раздела структурных элементов играют принципиальную роль в развитии неоднородной деформации твердых тел. В частности они выступают как мезоконцентраторы напряжений;

5. Разрушение есть завершающая стадия деформирования – макроскопическая потеря сдвиговой устойчивости, когда процессы локализации деформации и фрагментации выходят на макромасштабный уровень.

При моделировании процессов деформации и разрушения твердых тел эти основные положения в зависимости от постановки задачи и целей исследования могут быть приняты во внимание в рамки как уже существующих, так и специально разработанных моделей.

2. Масштабные и структурные уровни деформируемого материала. Особенности описания деформации на микро- мезо- и макроуровнях. Для адекватного описания процессов деформации и разрушения, согласно подходу физической мезомеханики, необходимо одновременное и взаимосогласованное рассмотрение трех масштабных уровней: микро, мезо, и макро [1–8], для которых должны быть развиты принципиально разные методы исследования.

Это положение может быть обосновано, например, с позиций системологии [18], в которой изучаются объекты, как сложные иерархически организованные системы. Важнейшими из иерархий являются пространственно-масштабная, которая отражает

организацию и пространственное расположение составляющих элементов изучаемого объекта, и функциональная иерархия, отражающая систему связей между отдельными частями и правила их функционирования. Некий выделенный для изучения объект представляет 0 (нулевой) ярус или мезомасштабный уровень в принятой здесь терминологии, –1-й ярус – микромасштабный уровень – это уровень микроскопической организации объекта, +1-й ярус – макроуроуровень – уровень интегральных характеристик и свойств объекта как целого, которые он проявляет в среде своего функционирования.

Понятие структурных уровней имеет несколько иной смысл. На каждом масштабном уровне может быть введена в рассмотрение своя система структурных уровней – структурных элементов, отражающих реальную внутреннюю организацию конкретного материала на соответствующем масштабном уровне.

Так, на уровне микроскопического рассмотрения это могут быть атомы внедрения, дефекты структуры (вакансии, дислокации), на мезоуровне – это ячейки, блоки, зерна, твердые включения и т.д.

Макроуровень – это уровень осредненного описания, интегрально учитывающий вклады в макроскопические процессы деформации и разрушение с микро- и мезоуровней [3]. Макроскопические механические характеристики материалов определены из макроскопических экспериментов, и именно они используются в различных расчетах, проводимых в рамках традиционного описания механики сплошных сред.

Понятие мезоскопического уровня приобретает ключевое значение, если мы хотим учесть влияние внутренней структуры материала на развитие макропроцессов и изучить развитие событий в локальных объемах среды, для которых характеристики процессов могут существенно отличаться от средних макроскопических величин. Особенно важную роль мезоскопический уровень изучения имеет при моделировании механизмов пластического деформирования и разрушения [3, 19, 20], а также при решении проблем, связанных с фазовыми переходами, структурными превращениями и химическими реакциями, протекающими при нагружении твердых тел.

При теоретическом описании и моделировании деформационных процессов на мезоуровне могут быть использованы методы континуальной механики [3, 19–21]. Принципиальное отличие от традиционного рассмотрения заключается прежде всего в том, что объектом изучения на мезоуровне является мезообъем материала, в котором в явном виде рассматриваются все значимые элементы внутреннего мезостроения. Эти элементы должны иметь явно выраженные внутренние границы и специфические физико-механические характеристики.

Вводится также понятие представительного мезообъема. Представительный мезообъем должен содержать достаточное для проведения усреднения количество структурных элементов. Следовательно, представительный мезообъем образует макрочастицу – точку континуума континуальной механики со средними по этому мезообъему параметрами: модулем Юнга, пределом текучести и т.д. Существенно, что суммарный внутренний момент представительного мезообъема равен нулю. Внутри же мезообъема для его подобластей в общем случае существуют нескомпенсированные внутренние моменты, поэтому на мезоуровне следует вводить кроме силовых также и моментные напряжения [1, 3].

В силу большой неопределенности моментных параметров целесообразно рассматривать упрощенные модели, которые позволяют реализовать схему деформирования "сдвиг + поворот", т.е. учесть независимые повороты мезофрагментов без явного введения моментных напряжений и изгибов кручений [3, 5, 7].

Таким образом, методология физической мезомеханики предполагает одновременное и самосогласованное рассмотрение деформационных процессов одновременно на трех масштабных уровнях. Этот подход предполагает явное рассмотрение всех значимых структурных элементов на каждом масштабном уровне и учет процессов самоорганизации внутренней структуры в ходе деформирования, а также адаптацию материала как системы к приложенным нагрузкам. В этом смысле разрушение или

потеря материалом функциональных свойств, глобальная потеря сдвиговой устойчивости означает его дальнейшую неспособность адаптироваться к внешним воздействиям.

Специфика механизмов пластического деформирования на каждом масштабном уровне определяет и специфические методы моделирования деформационных процессов на микро-, мезо- и макроуровнях.

На макроуровне пластическая деформация нагружаемого материала предполагает любое, необходимое для сохранения сплошности, формоизменение среды под действием приложенных сил (до начала разрушения). Это формоизменение – упругопластическая деформация – обеспечивается физическими механизмами на микро- и мезоуровнях. Таким образом, на макроуровне изучается деформируемый континуум, и возможно использование всех существующих средств и методов континуальной механики в рамках феноменологических моделей и усредненных макроскопических физико-механических параметров.

На микроуровне происходят дискретные сдвиги в определенных направлениях (системах скольжения). Величина этих микросдвигов определена модулем вектора Бюргерса. Большие успехи в моделировании деформаций на микроуровне достигнуты при использовании методов молекулярной и элементной динамики [22–24], в основу которых положены дискретные методы описания – изучается система дискретных взаимодействующих частиц. В рамках развиваемого подхода любые результаты относительно поведения и эволюции микроструктуры нагружаемого материала формулируются в терминах макроскопических (по сравнению с микроуровнем) параметров. Например, в терминах континуальной теории дислокации для описания средних скоростей деформаций индивидуальных частиц мезообъемов [3, 7]. Это связано с необходимостью дальнейшего рассмотрения деформирования на мезо- и макроуровнях на основе методов континуальной механики.

Мезоуровень, как промежуточное связующее звено, имеет свои специфические особенности. С одной стороны, здесь допустимо описание поведения материала как сплошной среды, а с другой – остаются существенными проявления дискретности микросдвигов и ограниченность формоизменения мезоэлементов. Как следствие для мезообъемов, существенными могут оказаться нескомпенсированные внутренние моменты, приводящие к поворотам индивидуальных фрагментов. Моделирование этого процесса позволяет реализовать в расчетах схему деформирования "сдвиг + поворот".

Таким образом, на мезоуровне объектом изучения являются мезообъемы материала, где явно учитываются как значимые элементы мезостроения, так и их взаимодействия, смещения и повороты, а также способность к формоизменению. Внутренняя деформация этих мезоэлементов обеспечивается физическими механизмами, развивающимися на микроуровне – потоком деформационных дефектов. В свою очередь, как уже отмечалось, представительный мезообъем является макрочастицей материала и обладает всеми физикомеханическими характеристиками, которые присущи материалу как микрообъекту.

3. Цели работы. Основная задача представляемой работы состоит в иллюстрации изложенных выше идей на простых примерах. В соответствии с этим ставятся следующие конкретные цели.

1. Описать макроскопическую деформацию (на мезо- и макроуровнях) как релаксационный процесс. Записать релаксационное определяющее уравнение с дислокационной кинетикой эластических сдвигов на микроуровне и выполнить в качестве примеров моделирование σ–ε диаграмм при растяжении стержней и эволюции плоских волновых фронтов при ударноволновом нагружении пластин.

2. Смоделировать неоднородную деформацию на мезоуровне, принимая во внимание дислокационную динамику на микроуровне.

3. Связать деформацию на макроуровне с развитием деформационных процессов на микро- и мезоуровнях и формированием субструктур в ходе нагружения.

Для решения поставленных задач последовательно рассмотрим вопросы моделирования деформации на различных структурных уровнях.

4. Микроуровень. На микроскопическом уровне обеспечивается деформация фрагментов мезоструктуры, в том числе и аккомодационная, при их смещениях и поворотах. Элементарными носителями пластической деформации на этом уровне выступают различные дефекты структуры: вакансии, дислокации и дисклинации.

Пластическая деформация на микроуровне, в рамках развиваемого подхода, описывается с континуальной точки зрения. Рассматриваются не индивидуальные дефекты структуры, а дислокационно-дисклинационный континуум. Описание поведения индивидуальных дефектов может быть достигнуто другими методами, например, методами молекулярной динамики.

Для изотропной среды без внутренних моментов определяющие уравнение запишем, следуя [3], в релаксационной форме

$$\dot{\sigma}_{ij} = \lambda\dot{\theta}^e\delta_{ij} + 2\mu(\dot{\varepsilon}_{ij}^T - \dot{\varepsilon}_{ij}^p) \qquad (1)$$

Здесь полные скорости деформаций $\dot{\varepsilon}_{ij}^T$ есть суммы их упругих $\dot{\varepsilon}_{ij}^e$ и пластических составляющих; $\theta^e = \varepsilon_{ii}^T$ – объемная деформация, а $\dot{\varepsilon}_{ii}^p = \dot{\varepsilon}_{11}^p + \dot{\varepsilon}_{22}^p + \varepsilon_{33}^p = 0$ согласно постулату о пластической несжимаемости деформируемого материала.

Таким образом, пластическая деформация рассматривается как релаксационный процесс: в релаксационных определяющих уравнениях (1) приращения силовых напряжений пропорциональны приращениям полных деформаций, а релаксируют они по мере развития пластических составляющих деформаций, которые могут быть описаны заданием соответствующих кинетик для скоростей пластических деформаций $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$.

Рассмотрим в качестве примеров две задачи упругопластического деформирования, для решения которых эффективным оказалось привлечение микроскопического подхода, – использование кинетических уравнений, описывающих эволюцию дислокационного континуума при вычислении скоростей пластических сдвигов [25]:

1. Моделирование σ–ε диаграмм при одноосном нагружении стрежней.

2. Моделирование процесса распространения плоских упругопластических волн при ударноволновом нагружении металлов.

Ранее была предложена микродинамическая модель описания пластического течения материала с дислокационной кинетикой для скорости пластических сдвигов [3, 25, 26], которая применена в настоящей работе для вычисления скорости главного пластического сдвига и вклада в напряжение течения с микроуровня. Релаксационная форма записи определяющих уравнений (1) для случая одноосного нагружения стержней принимает вид

$$\dot{\sigma}_1 = E\left(\dot{\varepsilon}_1^T - \tfrac{4}{3}\dot{\gamma}^p\right), \quad \sigma_2 = \sigma_3 = 0 \qquad (2)$$

где $\dot{\sigma}_1$ – скорость изменения напряжения; $\dot{\varepsilon}_1^T$ – скорость полной деформации; $\dot{\gamma}^p$ – главный пластический сдвиг ($\dot{\gamma}^p = \tfrac{1}{2}(\dot{\varepsilon}_1^p - \dot{\varepsilon}_2^p)$); E – модуль Юнга. Такой подход позволяет также учесть скоростную чувствительность материала. Приращение напряжения в (2) $\dot{\sigma}_1 dt$ пропорционально приращению полной деформации $\dot{\varepsilon}_1 dt$, а релаксируют напряжения по мере развития пластических сдвигов $\dot{\gamma}^p dt$. Таким образом, в каждом конкретном случае деформирования вырабатывается динамическое равновесие, отражающее условия нагружения, с одной стороны, и реакцию материала, с другой.

Известно, что во многих случаях на начальных этапах пластического деформирования мезоструктура материала не дает заметного вклада в пластическое течение. В

этом случае можно ограничиться чисто микроскопическим описанием, когда изменения претерпевает дислокационный континуум в целом. В расчетах использовалось широко известное в физике пластичности уравнение Орована

$$\dot{\gamma}^p = gbN(\gamma^p, \tau) f(\gamma^p) v(\tau, \tau_0') \operatorname{sign}(\tau_*) \tag{3}$$

$$\tau_* = \tau - \tau_{bs}$$

Кинетические уравнения [3, 25, 26], задающие эволюцию дислокационного континуума в формуле Орована, позволяют учесть историю нагружения и описать неидеальный эффект Баушингера при смене знака нагружения [7]. Таким образом, аккомодационная пластическая деформация на микроуровне обеспечивается изменением скалярной плотности дислокаций N, доли подвижных дислокаций f и скорости их коллективного движения v [25, 26] в (3), где g – ориентационный множитель; b – модуль вектора Бюргерса; $\tau = {}^1/_2(\sigma_1 - \sigma_2) = {}^1/_2\sigma_1$ – действующее сдвиговое напряжение ($\sigma_2 = 0$ в случае одноосного нагружения); τ_0' – равновесное текущее результирующее сопротивление сдвигу, которое будет задано ниже определенным образом с учетом изменения внутренней структуры материала; τ_{bs} – накопленные внутренние напряжения; τ_* – текущее (эффективное) действующее напряжение.

В кинетическом уравнении (3) введено распределение деформационных дефектов по напряжениям старта τ_{si}, что позволяет описывать в том числе и микропластические деформации [27, 28], когда приложенные напряжения ниже макроскопического предела текучести:

$$\dot{\gamma}^p = \sum_i \Delta\dot{\gamma}_i^p, \quad \Delta\dot{\gamma}_i^p = gbN(\gamma^p) f(\gamma^p) P_i(\tau) v_i(\tau, \tau_{si}) \operatorname{sign}(\tau_*) \tag{4}$$

Здесь $v_i(\tau, \tau_{si})$ – скорость движения i-й фракции дислокаций; τ_{si} – напряжение старта i-й фракции дислокаций. Вероятность движения i-й фракции дислокаций при напряжениях τ определяется выражением (нормальный закон распределения в приведенном примере):

$$P_i(\tau) = \int_{\tau_{s(i-1)}}^{\tau_{si}} \varphi d\tau, \quad \varphi = \frac{1}{\delta\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{\tau_0' - \tau_{si}}{2\delta^2}\right] \tag{5}$$

Подвижными дислокациями при напряжении τ будут те, для которых $\tau_{si} \le \tau$, δ – дисперсия в законе распределения. Величина τ_0' приобретает смысл среднего в законе распределения и определяет макроскопический предел текучести. Как будет показано ниже, в процессе нагружения τ_0' определяется с учетом дальнодействующих внутренних напряжений τ_{bs}, отражающих вклад в напряжение течения с микроуровня от леса дислокаций, а на развитых стадиях пластической деформации – с учетом эволюции мезоструктур, τ_0' растет, если материал обладает деформационным упрочнением. Следует иметь в виду, что текущее напряжение τ содержит также и неравновесную составляющую, которая особенно велика при высокоскоростной деформации. В предлагаемом подходе эта неравновесная составляющая определяется законом релаксации, т.е. конкретной кинетикой, определяющей эволюцию дислокационного континуума и скорости пластических сдвигов $\dot{\gamma}^p$.

В настоящей работе для определения дальнодействующих внутренних напряжений использовалась хорошо известная в физике пластичности зависимость $\tau_{bs} = \alpha\mu b\sqrt{N}$, где μ – модуль сдвига, а значение константы α для большинства материалов находится в пределах 0,2–0,5 [29].

Для определения плотности дефектов $N(\gamma^p)$, доли подвижных дислокаций $f(\gamma^p)$ и их

скоростей $\nu_i(\tau, \tau_{si})$ использовались полуэмпирические зависимости. Причем, в выражении для плотности дислокаций γ^p заменялась на кумулятивную пластическую деформацию $\gamma_k^p = \int_0^t |\dot{\gamma}^p| dt$, что позволило учесть необратимость накопленной пластической деформации при смене знака нагружения:

$$N = N^* + (N_0 + N' - N^*) \exp\left(-\gamma_k^p \frac{A}{|g|b}\right), \quad N' = \begin{cases} (\tau - \tau^*)/c, & \text{при } \tau > \tau^* \\ 0, & \text{при } \tau \leqslant \tau^* \end{cases} \tag{6}$$

где N_0 – начальная плотность дислокаций; N^* – предельно достижимая плотность дефектов при деформировании; константа A пропорциональна величине, обратной свободному пробегу дислокаций между актами размножения; N' – плотность дислокаций за счет их гетерогенного зарождения; τ^* – пороговое значение сдвигового напряжения, при котором возможен процесс гетерогенного зарождения дефектов; c – материальная постоянная.

Аналогично, в выражении для доли подвижных дислокаций:

$$f = f^* + (f_0 - f^*) \exp\left(\gamma_k^p - \gamma_{kr}^p \frac{B}{|g|b}\right) \tag{7}$$

где f_0 – начальная доля подвижных дефектов; f^* – предельно достижимая доля подвижных дефектов; константа B пропорциональна величине, обратной пробегу дислокаций до закрепления. Для учета различия в сопротивлении движению дислокаций при прямом и обратном нагружении в выражение для доли подвижных дефектов вводится реверсивная пластическая деформация γ_{kr}^p:

$$\gamma_{kr}^p = \gamma_k^p (1 - N / N^*) \quad \text{при смене знака } (\tau - \tau_{bs}) \tag{8}$$

Фракции дислокаций, имеющие одинаковые напряжения старта τ_{si}, движутся с одинаковыми скоростями ν_i, тем большими, чем больше разница между напряжением старта и действующим сдвиговым напряжением τ:

$$\nu_i = \begin{cases} \nu_0 \dfrac{(ST_i)^2}{1 + (ST_i)^2} & \text{при } |\tau| \geqslant \tau_{si} \\ 0 & \text{при } |\tau| < \tau_{si} \end{cases} \tag{9}$$

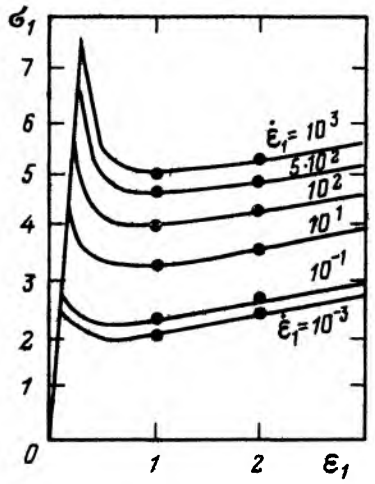
Здесь $ST_i = (|\tau| - \tau_{si})/\beta$, β – коэффициент торможения; ν_0 – скорость распространения сдвиговой волны.

Таким образом, предлагаемая зависимость для скорости пластических сдвигов $\dot{\gamma}^p$ включает в себя историю нагружения, связанную с эволюцией дислокационного континуума. Представленные уравнения отражают тот факт, что и при малых возмущениях находятся деформационные дефекты, которые приводят к микропластическим деформациям.

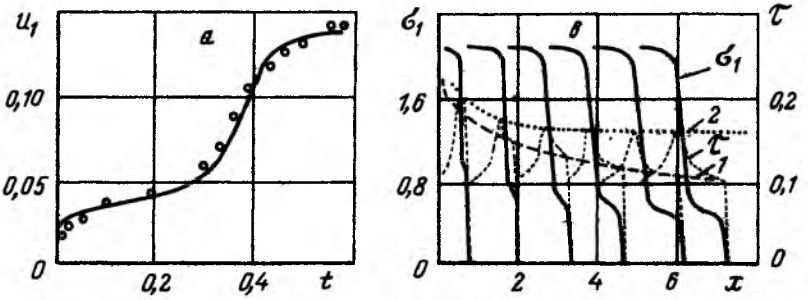
В качестве примера на фиг. 1 приведены результаты расчета σ [Кбар] – ε [%] диаграмм мягкой стали при разных скоростях деформирования в сравнении с экспериментами [30]: $N_0 = 2\ 10^8$ см$^{-1}$; $a = 10^{11}$ см$^{-2}$; $b = 2{,}5 \cdot 10^{-8}$ см; $\nu_0 = 3{,}25 \cdot 10^5$ см/с.

Другим примером является ударно-волновое нагружение металлов. Эффекты пластического течения (релаксация упругих предвестников, эволюция нестационарных волновых фронтов, особенности разгрузки – ее упруговязкопластический характер) особенно ярко проявляются при нагружениях металлов ударными волнами сравнительно малых амплитуд $\sigma_1 < 10$ ГПа.

Система уравнений, описывающая распространение в баротропной среде таких плоских упругопластических волн включает в себя



Фиг. 1



Фиг. 2

уравнение движения

$$\rho \partial u_1 / \partial t = \partial \sigma_1 / \partial x \tag{10}$$

уравнение неразрывности

$$\dot{\varepsilon}_1 = \partial u_1 / \partial x = \partial V / \partial t, \quad V = \rho_0 / \rho \tag{11}$$

Здесь ρ_0 и ρ – начальная и текущая плотности; $\dot{\varepsilon}_2^T = \dot{\varepsilon}_3^T = 0$; u_1 – массовая скорость; $u_2 = u_3 = 0$, а $\sigma_2 = \sigma_3 \neq 0$; x – лагранжева координата; t – текущее время.

Замыкается система релаксационным уравнением состояния, задающим связь между тензорами напряжений и деформаций $\sigma_1 = f(\varepsilon_1)$.

Компонента тензора напряжений σ_1 разбивается на шаровую и девиаторную части: $\sigma_1 = -P + S_1$, где P – среднее давление; S_1 – деиатор напряжений.

Так как амплитуды действующих напряжений сравнительно малы, для описания шаровой части напряжений корректно воспользоваться баротропным уравнением $P = P(\rho)$. В данной работе использовалась кубическая зависимость:

$$P = a_1\theta + a_2\theta^2 + a_3\theta^3 \tag{12}$$

где θ – объемная деформация. Коэффициенты a_1, a_2, a_3 определены экспериментально для многих материалов [31, 32].

Сдвиговые напряжения могут быть найдены из определяющего уравнения релаксационного типа, которое несколько отличается от (2) в силу одномерности деформации:

$$\dot{S}_1 = 4/3\mu(\dot{\varepsilon}_1^T - 2\dot{\gamma}^p) \tag{13}$$

где μ – модуль сдвига.

Скорость накопления деформаций определяется заданием функции для скорости пластических сдвигов $\dot{\gamma}^p$, как и в предыдущем случае.

На фиг. 2 приведен пример расчета (сплошная линия) распространения плоской ударной волны интенсивностью 2,1 Гпа А16061-Т6 в сравнении с экспериментами [33] (точки): u_1 [мм/мкс] – t [мкс].

Кинетические уравнения (3)–(9) позволяют правильно описать как форму волны нагружения (фиг. 2, *а*), так и эволюцию нестационарных волновых фронтов по мере их распространения вглубь материала (фиг. 2, *b*), а также правильную релаксацию сдвиговых напряжений τ в упругом предвестнике (кривая *1*) и во фронте ударной волны (кривая *2*) фиг. 2, *b*) [7, 27, 28, 33–36], x [мм].

5. Релаксационные определяющие уравнения с зависимостями для времен релаксации. Для решения 2*D* и 3*D* задач на мезо- и макроуровнях, а также при решении задач прикладного характера удобно переформулировать полученные определяющие уравнения в терминах времен релаксации.

В модель вводятся две функции времен релаксации t_{p1} и t_{p2} (или больше в зависимости от числа уровней), которые связаны с разными физическими механизмами, в данном случае с развитием пластических деформаций, обусловленных элементарными носителями различных масштабов. Тогда $\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}^p_{\text{tr}} + \dot{\gamma}^p_{\text{rot}}$, где $\dot{\gamma}^p_{\text{tr}}$ – трансляционная составляющая скорости пластических сдвигов, а $\dot{\gamma}^p_{\text{rot}}$ связана с развитием локализованной пластической деформации на мезоуровне, в том числе с образованием блоков их перемещениями и поворотами. Имеется в виду, что $\dot{\gamma}^p_{\text{tr}}$ обусловлена, в основном, базовым и аккомодационным скольжением на ранних стадиях пластического течения, в то время как $\dot{\gamma}^p_{\text{rot}}$ обусловлена коллективными эффектами и отражает более поздние стадии пластического течения, для которого характерны повороты фрагментов мезоструктуры [3, 7, 25]. Теперь можно записать

$$\dot{\tau} = \mu(\dot{\varepsilon}_1^T - 2\dot{\gamma}^p) = \mu\left(\dot{\varepsilon}_1 - \frac{\tau - \tau_0'}{\mu t_{p1}} - \frac{\tau - \tau_0''}{\mu t_{p2}}\right) \tag{14}$$

Предложенный способ учета вкладов в пластический сдвиг, вносимый элементарными носителями пластической деформации разных масштабов l, позволяет описать пластическую деформацию как релаксационный процесс. Он прост в реализации и легко может быть связан с реальными физическими процессами, развивающимися на разных структурных уровнях через задание функций соответствующих времен релаксации (например, быстрая релаксация напряжений во фронте ударной волны (t_{p1}) и медленная релаксация при выходе на полочку (t_{p2}), которые обусловлены разными физическими механизмами.

Для решения многомерных задач релаксационное уравнение (13) может быть обобщено в виде

$$\dot{s}_{ij} = 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{ij}^T - \frac{\dot{\varepsilon}_{ii}}{3}\delta_{ij} - s_{ij}\frac{1 - \sigma_I^0/\sigma_I}{2\mu t_r}\right) \tag{15}$$

При написании уравнений (15) полагалось, что все компоненты тензора напряжений релаксируют сходным образом в соответствии с законом релаксации,

записанном для второго инварианта напряжений σ_I. Этот закон определен из одномерных расчетов ($\sigma_I = 2\tau$ для плоской волны), примеры которых приведены выше.

6. Мезоуровень. Для моделирования процессов деформации мезообъемов воспользуемся полученными выше результатами. При решении задач в динамической постановке будем использовать определяющие уравнения в релаксационной форме (1), (15) с соответствующими зависимостями для времен релаксации [25, 35].

Рассмотрим только двумерные расчеты в динамической и квазистатической постановках как для плосконапряженного состояния, так и для плоской деформации. В [3, 19, 20] приведены все основные уравнения, и обсуждены способы их решения.

Система динамических уравнений для двухмерных плоских задач имеет следующий вид.

Уравнения для скоростей деформаций и скоростей поворота:

$$\dot{\varepsilon}_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x}, \quad \dot{\varepsilon}_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y}, \quad \dot{\varepsilon}_{xy} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\delta x} + \frac{\partial u_x}{\partial y}\right)$$

$$\dot{\omega}_z = -\dot{\omega}_{xy} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_y}{\partial x} - \frac{\partial u_x}{\partial y}\right) \tag{16}$$

где $\dot{\varepsilon}_{zz} = \dot{h}/h$ – для плоского напряженного состояния; $\varepsilon_{zz} = 0$ – для плоской деформации.

Уравнения движения в плоских координатах x, y:

$$\rho\frac{\partial u_x}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y}, \quad \rho\frac{\partial u_y}{\partial t} = \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y}$$

$$\sigma_{xy} - \sigma_{yx} = M, \quad M = J\dot{\Omega}_z - \frac{\partial \mu_{xz}}{\partial x} - \frac{\partial \mu_{yz}}{\partial y} \tag{17}$$

Уравнение неразрывности:

$$\dot{V}/V = \dot{\varepsilon}_{xx} + \dot{\varepsilon}_{yy} + \dot{\varepsilon}_{zz} \tag{18}$$

Уравнения состояния (определяющие уравнения):

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^S + \sigma_{ij}^A$$

$$\sigma_{ij}^A = -\sigma_{ij}^A = \begin{cases} 0 & \text{при } \varepsilon^p = 0 \\ \alpha F(\text{grad}(\varepsilon^p)) & \text{при } \varepsilon^p \neq 0 \end{cases} \tag{19}$$

$$\sigma_{ij}^S = -P\delta_{ij} + s_{ij}, \quad \dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \quad \dot{\varepsilon}_{ij}^p = \dot{\lambda}s_{ij}$$

$$\frac{Ds_{xx}}{Dt} = 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{xx} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) - 2\mu\dot{\lambda}s_{xx}, \quad \frac{Ds_{yy}}{Dt} = 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{yy} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) - 2\mu\dot{\lambda}s_{yy} \tag{20}$$

$$\frac{Ds_{xy}}{Dt} = 2\mu\dot{\varepsilon}_{xy} - 2\mu\dot{\lambda}s_{xy}, \quad \frac{Ds_{zz}}{Dt} = 2\mu\left(\dot{\varepsilon}_{zz} - \frac{1}{3}\frac{\dot{V}}{V}\right) - 2\mu\dot{\lambda}s_{zz}$$

где $\sigma_{zz} = -P + s_{zz} = 0$ – для плоского напряженного состояния, $s_{zz} = -(s_{xx} + s_{yy})$ – для плоской деформации, $Ds_{ij}/Dt = \dot{s}_{ij} - \dot{\omega}_{ik}s_{kj} + s_{ik}\dot{\omega}_{kj}$ – значение производной Яумана (точка вверху означает производную по времени); $\dot{\lambda}$ – скалярный параметр в теории пластического течения.

$$s_{xx}^2 + s_{yy}^2 + 2s_{xy}^2 + s_{zz}^2 = \tfrac{2}{3}Y_0^2 \tag{21}$$

Здесь x, y – пространственные координаты; u_x – скорость в направлении x; u_y – скорость в направлении y; σ_{xx}, σ_{yy}, σ_{xy}, σ_{zz} – компоненты тензора силовых напряжений; μ_{xz}, μ_{yz} – компоненты тензора моментных напряжений; s_{xx}, s_{yy}, s_{xy}, s_{zz} – девиатор напряжений; ε_{xx}, ε_{yy}, ε_{xy}, ε_{zz} – компоненты тензора деформации; P – гидростатическое давление; $V = \rho_0/\rho$ – относительный объем; μ – модуль сдвига; h – толщина пластины; Y_0 – начальное значение предела текучести; J – момент инерции частиц среды. Для определения функции давления также использовалось уравнение (12). Для расчета пластического течения применялась либо процедура приведения к мгновенному кругу текучести Мизеса, либо релаксационная форма определяющих уравнений (15).

Реализация в расчетах реальных систем скольжения в соответствии с симметрией изучаемых кристаллов и активизации некоторых из них (или всех) при нагружении является чрезвычайно трудоемкой проблемой и требует рассмотрения задачи в 3D постановке. Однако 2D расчеты могут оказаться полезными для иммитации поведения реальных кристаллов с ограниченным числом активных плоскостей скольжения. Так на фиг. 3, *а* представлен образец, состоящий из трех зерен, заключенных в более жесткую рамку. Жесткая рамка позволяет смоделировать стесненные условия деформации. Представленные на фиг. 3 результаты были получены в [20] при явном введении в расчет систем скольжения. Задача решена в квазистатической постановке. Каждое зерно имеет только одну активную систему скольжения (на фиг. 3, *а*, $\mathbf{n}_i$ – нормали к плоскостям скольжения). На фиг. 3, *b* представлены изолинии компоненты деформации ε_{22} при растяжении мезообъема вдоль оси x_2 [см]. Замкнутость изолиний между соседними полосами скольжения свидетельствует о наличии поворотов подобластей кристалла внутри изолинии. Это один из простых примеров, который ярко демонстрирует, как резко возрастает неоднородность деформации (появление полос локализованного сдвига и развитие поворотов) при усложнении системы (наличие базовой системы скольжения и, как следствие, запрет на однородную деформацию, различие физико-механических характеристик для зерен разной ориентации).

Мезообъем, состоящий из многих зерен, реагирует на нагружение образованием системы взаимно сопряженных полос локализованного сдвига [7, 37]. Причем, в расчетах работ [7, 37] каждое зерно имело индивидуальный предел текучести, т.е. разрешена любая, необходимая для аккомодации деформация. Сформировались лидирующие полосы сдвига, вдоль которых отдельные блоки смещаются как целые. Эти блоки содержат большое количество зерен. Внутри они деформируются также неоднородно, и в дальнейшем возможно формирование более мелких фрагментов, которые назовем структурными элементами деформации (СЭД) из-за их способности смещаться и поворачиваться как целые, качественно изменяя тем самым общую картину деформации. В этом же мезообъеме, но подвергнутом воздействию ударной волны [7], реализуется система полос локализованного сдвига, порожденная поворотами отдельных зерен либо мезообъемов, окружающих тройные стыки зерен. Эти повороты особенно ярко проявляются в полях скоростей [7].

Все проведенные расчеты и представленные примеры ярко демонстрируют неоднородность развития пластических деформаций в мезообъемах структурно-неоднородных сред с образованием блоков различных размеров.

Процесс образования СЭД носит универсальный характер. В любой структурно-неоднородной среде деформация на мезоуровне развивается как сугубо локальный процесс и сосредоточена, в основном, в узких зонах, покрывая весь образец системами сопряженных полос Причиной образования этих полос локализованного сдвига является структурная неоднородность материала, прежде всего, наличие внутренних границ, которые являются мезоконцентраторами напряжений. Наличие определенных систем скольжения и, как результат, ограниченность формоизменения, является другим важнейшим фактором формирования более мелкомасштабных полос локализации уже внутри фрагментов, например, внутри зерен поликристаллов.

Моделирование процесса образования СЭД показало, что этот процесс проходит несколько стадий:

1. На стадии упругого нагружения в структурно-неоднородном материале за счет концентраторов мезоскопических масштабов различной физической природы формируется неоднородное поле напряжений.

2. Затем на начальной стадии развития пластической деформации в направлениях максимальных касательных напряжений (их ориентация определена структурной неоднородностью материала на мезоуровне и условиями нагружения) формируются полосы локализованного сдвига. В областях, ограниченных полосами локализованной деформации внутри СЭД, материал оказывается слабо деформированным.

3. Дальнейшее деформирование приводит к нарастанию локализованной пластической деформации и смещениям и поворотам блоков (мезообъемов) материала. Весь мезообъем материала оказывается разбитым на блоки (СЭД). Особенно ярко этот процесс проявляется в полях скоростей. Именно по изменениям скоростей смещений и поворотов выявляются СЭД.

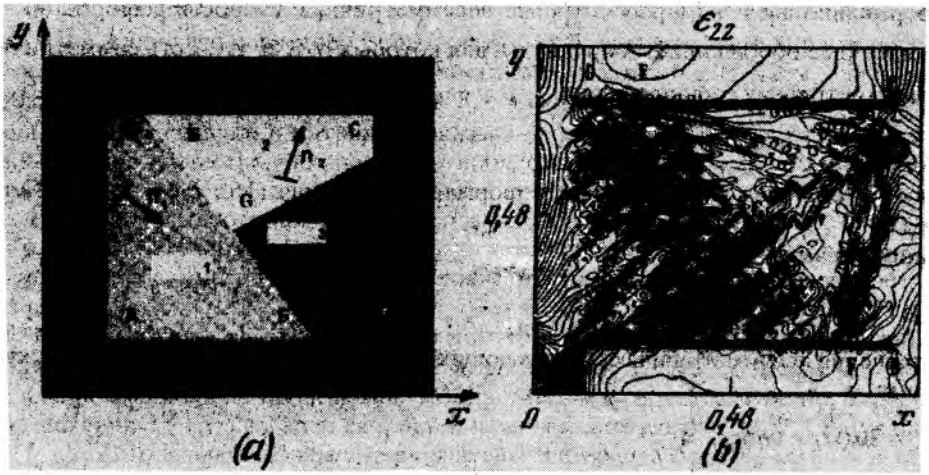
4. Разрушение материала в дальнейшем происходит по границам сформировавшихся блоков. Главную роль в образовании мезотрещин играют повороты блоков.

Выполненные модельные расчеты качественно хорошо согласуются с экспериментальными данными [6, 38, 39].

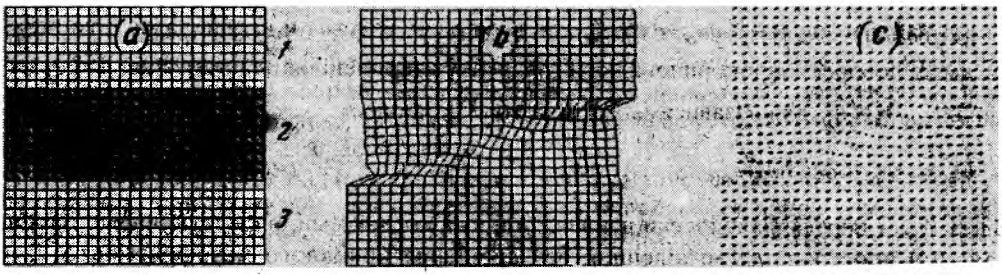
7. Модель среды, учитывающая повороты конечных объемов материала на мезоуровне. Модель среды с независимыми поворотами, в которой учтены как силовые, так и моментные напряжения, а теория деформаций кроме несимметричного тензора деформаций вводит в рассмотрение изгибы – кручения, рассмотрена нами в [3, 5, 7]. При решении динамических задач соответствующие определяющие соотношения должны быть записаны в релаксационной форме, так как релаксационные процессы могут оказаться существенными, их учет особенно важен при ударно-волновом нагружении материалов [3, 37, 38, 40, 41].

В качестве иллюстрации приведем пример расчета пластической деформации мезообъема для случая плоской деформации. В силу большой неопределенности в определении численных значений параметров для моментных моделей, рассмотрим простую модель, которая позволяет учесть независимые повороты мезофрагментов конечных размеров без явного расчета моментных напряжений и изгибов кручений.

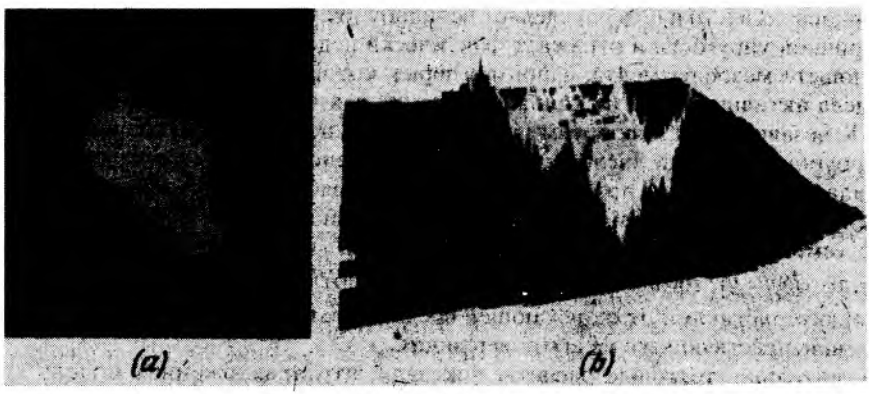
Система уравнений (16)–(21) позволяет корректно описывать независимые повороты Ω_z конечных мезообъемов, не рассчитывая явно эти повороты и моментные напряжения, если есть физические соображения для определения антисимметричной составляющей силовых напряжений (19) и сделаны соответствующие договоренности по определению скоростей деформаций уравнений (16). Моментная теория упругости, как таковая, создавалась как попытка методами континуальной теории упругости учесть неупругие эффекты, связанные с наличием внутренней структуры материала и ее эволюции на начальных этапах нагружения. Бесконечно малые точки такого континуума имеют шесть степеней свободы: три смещения (или скорости u_i) и три независимых поворота Ω_i, отличных от ω_i, компоненты которого есть компоненты $\frac{1}{2}\operatorname{rot}\bar{u}$. В действительности на мезоуровне происходят повороты и смещения мезофрагментов, которые имеют конечные размеры, и которые, как таковые, явно вводятся в рассмотрение при моделировании поведения нагружаемых мезообъемов. Поворот и смещение конечного фрагмента, а также его деформация полностью определены его полем скоростей. Поэтому деформации таких мезофрагментов могут быть определены уравнениями (16), которые являются корректными на упругой стадии. По мере развития пластического течения нарастает неоднородность пластической деформации внутри отдельных фрагментов; их ограниченная способность к формоизменению, различия физико-механических параметров для разных фрагментов и их взаимодействия друг с другом являются причинами нарастания независимых поворотов.



Фиг. 3



Фиг. 4



Фиг. 5

В несимметричной упругости вводятся в рассмотрение несимметричные силовые $\sigma_{ij} \neq \sigma_{ji}$ и моментные $\mu_{ij} \neq \mu_{ji}$ напряжения, которые учтены в уравнениях (16)–(21). Для приращений силовых напряжений можно записать

$$\dot{\sigma}_{ji} = 2\mu\dot{\gamma}_{(ji)} + 2\alpha\dot{\gamma}_{(ji)} \quad (i \neq j) \tag{22}$$

где формально введены в рассмотрение несимметричные скорости деформации γ_{ji} как некоторые обобщенные координаты, для которых $\gamma_{(ji)}$ и $\gamma_{(ji)}$ есть симметричная и антисимметричная составляющие:

$$\dot{\gamma}_{ji} = \dot{\varepsilon}_{ji} + (\dot{\Omega}_k - \dot{\omega}_k)e_{kji} \tag{23}$$

Здесь $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – обычная симметричная деформация, заданная (16); e_{kji} – тензор Леви–Чивиты.

Таким образом

$$\gamma_{(ji)} = -(\dot{\Omega}_k - \dot{\omega}_k)e_{kji} \tag{24}$$

а приращения несимметричных составляющих тензора силовых напряжений окажутся равными

$$\dot{\sigma}^A_{ji} = 2\alpha(\Omega_k - \omega_k)e_{kji} \tag{25}$$

Для рассматриваемого случая плоской деформации получим

$$\sigma_{12} = \sigma_{xy} = 2\mu\varepsilon_{12} - 2\alpha(\Omega_3 - \omega_3), \quad \sigma_{21} = \sigma_{yx} = 2\mu\varepsilon_{12} + 2\alpha(\Omega_3 - \omega_3) \tag{26}$$

Учитывая, что $\omega_k = -\frac{1}{2}\partial u_\alpha / \partial x^\beta e_{\alpha\beta k}$ как компоненты $\mathrm{rot}\,\bar{u}$, и предполагая, что независимые повороты пропорциональны градиенту накопленной пластической деформации $\varepsilon^p = \sqrt{\frac{3}{2}\varepsilon^p_{ij}\varepsilon^p_{ij}}$ для независимых поворотов Ω_k, запишем

$$\Omega_k = -A_\alpha \tfrac{1}{2}\partial\varepsilon^p / \partial x^\beta e_{\alpha\beta k}$$

Здесь A_α являются фактически направляющими косинусами, определяющими ориентацию в пространстве мгновенной оси вращения конечного мезофрагмента. Для рассматриваемого случая плоской деформации получаем

$$\Omega_3 = \tfrac{1}{2}(A_2\partial\varepsilon^p / \partial x - A_1\partial\varepsilon^p / \partial y) \tag{27}$$

Коэффициент α в (22) и (26) определяет величину отклонения силовых напряжений от симметричной упругости и отражает фактически недостаточную аккомодацию соответствующего мезофрагмента, например зерна, которая возникла в силу недостаточного числа активных систем скольжения и которая частично компенсируется поворотом. К независимым поворотам приводит также и наличие внутреннего движения на микроуровне: потоки дислокаций, особенно зернограничные потоки, т.е. внутри кристалла под действием приложенных нагрузок работает внутренний "мотор", заставляющий кристалл или его часть прокатываться по соседям. Это важно отметить в связи с тем, что и безмоментная теория, когда $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, также может привести к поворотам ($\bar{\omega}_k = \frac{1}{2}$, $\mathrm{rot}\,\bar{u} \neq 0$) конечных объемов, отличающихся физико-механическими характеристиками от окружающей среды, только за счет неоднородности поля напряжений, действующего на его поверхность.

Действительно, тестовые расчеты показали, что предложенная модель хорошо имитирует поведение кристаллов, для которых аккомодационная деформация в сопряженных системах скольжения недостаточно развита. На фиг. (4) приведены результаты таких расчетов, выполненных по этой модели, для "сэндвича" (фиг. 4, *a*), внутренняя прослойка которого имеет "спин" "$+A_\alpha$" либо "$-A_\alpha$" ("+" дает сдвиг вправо и поворот элемента по часовой стрелке (фиг. 4)), *a* "–" дает сдвиг влево и поворот элемента против часовой стрелки:

1,3 – обычная среда без внутренних моментов $\sigma_{12} = \sigma_{21}$; 2 – среда с внутренними некомпенсированными моментами ($\sigma_{12} \neq \sigma_{21}$); *b* – деформированная сетка; *c* – поле

скоростей. На фир. 5, *а* показана карта образца с обычной пластичной матрицей, способной к произвольному формоизменению, как того требуют приложенные нагрузки (с обычным критерием пластичности Мизеса), и с включением, для которого коэффициент $\alpha = +0{,}001$ Мбар. На фиг. 5, *в* поворот включения при растяжении образца образует складки в матрице (показана деформация ε^p). Эти расчеты качественно хорошо иллюстрируют реальные процессы поворотов конечных объемов деформируемого материала на углы от долей градусов до десятков при глубоких степенях деформаций, которые экспериментально изучались в [1, 2, 8, 13]. Следующий необходимый шаг – определение параметров, определяющих отклонение тензора напряжений от симметричного на мезоуровне по данным экспериментов для реальных материалов.

8. Макроуровень. На макроскопическом уровне описания, как уже упоминалось выше, используются методы континуальной механики. Вклады с микро- и мезоуровней в деформационный процесс могут быть учтены в соответствующих определяющих уравнениях через задание скоростей пластических сдвигов [3, 7, 25] (уравнения (2), (3) или (13)) и через вклады в сопротивление материала сдвигу.

Сопротивление сдвигу на микроуровне определяется эволюцией дислокационного континуума, а на мезоуровне – эволюцией мезоструктуры и формированием новых мезосубструктур.

Поэтому при моделировании σ–ε диаграмм при больших степенях деформации необходимо учесть не только эволюцию внутренней микроструктуры материала, но и образование различных субструктур, а также их вклады в напряжение течения. Эти процессы образования субструктур развиваются и моделируются на уровне мезоскопического масштаба, поэтому здесь используется термин "мезосубструктуры".

Вклад неоднородностей внутренней структуры в механические свойства материала изучается в контексте широко известного соотношения для напряжения течения, описываемого уравнением типа Холла – Петча, которое для сдвигового напряжения запишем в виде:

$$\tau_0' = \tau_0 + \tau_{b\backslash} + KD^{-1/2} \tag{28}$$

где K – параметр упрочнения, а D – средний диаметр зерна.

В более общем случае для напряжения течения можно записать следующее уравнение:

$$\tau_0' = \tau_0 + \tau_{bs} + \sum_t K_t L_t^{-m_t} \tag{29}$$

где K_t – коэффициенты, характеризующие степень деформационного упрочнения материала, вызванного влиянием соответствующей мезосубструктуры; L_t – характерные размеры формирующихся неоднородностей, а m_t могут изменяться от 0,25 до значений, превышающих единицу [42].

Использование дополнительных слагаемых в выражении для напряжения течения материала физически отражает тот факт, что эволюция дефектной структуры на микроуровне и образование мезосубструктур приводят к перераспределению полей напряжений в мезообъемах материала, противодействующих приложенной нагрузке. Как следствие, изменяются механические характеристики представительной макрочастицы. Правомерность такого подхода экспериментально подтверждается, например, исследованиями Л.Е. Мурра [42].

В настоящей работе моделируется процесс нагружения аустенитной стали. В экспериментах [43, 44] пластическому деформированию подвергались монокристаллы аустенитной стали. Количественный и качественный анализы показали, что характерные для стадии развитой пластической деформации субструктуры имеют сложный характер и могут быть разделены на три типа в зависимости от степени обжатия

кристалла: ячеистая субструктура; полосовая субструктура; фрагментированная субструктура.

Эволюция мезосубструктур в процессе пластической деформации сопровождается изменением-уменьшением характерных размеров неоднородностей, которые в некоторый момент выходят на насыщение: d, d_* – текущий и критический размеры дислокационных ячеек; s, s_* – текущее и критическое расстояние между субграницами полосовой субструктуры; l, l_* – текущий и критический размеры блоков фрагментированной субструктуры.

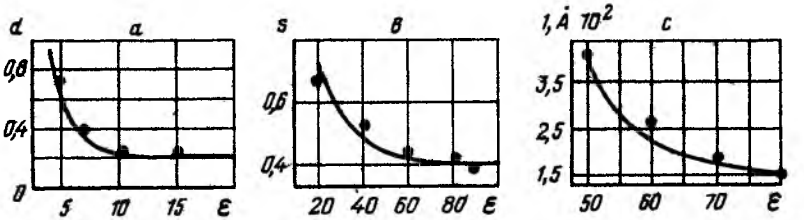
Известно, что для фиксированных значений величин деформаций параметры образовавшихся субструктур подчиняются уравнениям (28), (29). Однако эти соотношения непосредственно невозможно использовать в конкретных расчетах, в которых пластическая деформация непрерывно нарастает по мере нагружения образца, а, следовательно, и непрерывно меняются параметры образующихся мезосубструктур (d, s, l). Необходимо переформулировать уравнения (28), (29) так, чтобы был описан процесс эволюции субструктур по мере увеличения пластической деформации в соответствии с экспериментальным соотношением (29).

Процесс формирования и эволюции мезосубструктур в ходе пластического деформирования описан в настоящей работе с позиций синергетики [7]. Это означает, что пластическая деформация сопровождается процессами самоорганизации внутренней структуры материала и образованием субструктур (ячеистых, полосовых, блочных). Этот процесс описан как вероятностный, т.е. в соответствии с данными экспериментов [43, 44] рассчитывается вероятность существования той или иной мезосубструктуры, а вклад в напряжение течения пропорционален этой вероятности. Процесс эволюции внутренней структуры связан со стадийностью кривой течения материала [45]. При этом крайне важно, что вероятность существования определенной субструктуры при таком описании одновременно определяет и то, что при данной степени деформации "выживают", т.е. оказываются наиболее вероятными фрагменты субструктур определенного характерного размера. На фиг. 6 показана эволюция характерных размеров субструктур в зависимости от степени деформации для стали Х17Н14М3Б; точки – экспериментальные данные [43, 44], сплошные линии – результаты расчетов: a – средний размер a[мкм]; b – среднее расстояние между субграницами полосовой субструктуры s [мкм]; c – средний размер блоков фрагментированной субструктуры. Физически этот факт установлен экспериментально, а математически обоснован удовлетворением уравнениям типа Холла–Петча. Сказанное по сути и составляет феноменологию синергетического подхода, когда происходит формирование субструктур в ходе деформации, и по мере роста степени деформации средний характерный размер соответствующих субструктур становится меньше и меньше, приближаясь к критическому значению.

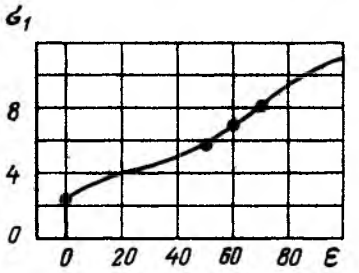
Для представления функций вероятностей существования мезосубструктур был выбран экспоненциальный закон распределения, который, как показали расчеты σ [кбар] – ε [%] диаграммы (фиг. 7), а также вероятностей существования соответствующих мезосубструктур (фиг. 8) и характерных размеров формирующихся неоднородностей (фиг. 6), оказался наиболее адекватным для описания эволюционирующей в ходе пластического деформирования внутренней структуры изучаемого материала. Таким образом, функции вероятностей $P_j(\gamma^p)$ могут быть представлены в виде

$$P_j(\gamma^p) = \int_{\gamma^p_{j*}}^{\gamma^p} \lambda_j \exp[-\lambda_j(\gamma^p - \gamma^p_{j*})]\, d\gamma^p \qquad (30)$$

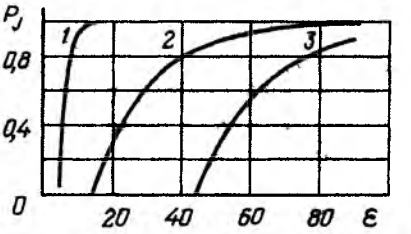
где γ^p_{j*}, λ_j – параметры в законе распределения, которые, как будет показано далее, непосредственно связаны с характеристиками мезосубструктур.



Фиг 6



Фиг 7



Фиг 8

Вклады субструктур в кривую течения для сдвигового напряжения τ запишем

$$\tau_0' = \tau_0 + K\rho^{1/2} + \sum_j K_j' P_j(\gamma^p) \qquad (31)$$

Подинтегральная функция в (30) есть функция, задающая плотность вероятностей, в данном случае в экспоненциальном законе распределения Соответствующие интегралы не задают долю наблюдаемой j-й мезосубструктуры по отношению к другим мезосубструктурам, а имеют смысл вероятностей существования мезосубструктур на соответствующей стадии пластического деформирования в том контексте, что их появление и эволюция сопровождаются повышением напряжения течения. Понятно, что некоторые мезосубструктуры могут сосуществовать с другими (фиг. 8): 1, 2, 3 – ячеистая, полосовая и фрагментированная субструктуры.

По предложенной выше схеме были рассчитаны зависимости напряжений от деформаций в условиях квазистатического нагружения при постоянной скорости полной деформации $\varepsilon^T = \text{const}$. На расчетной σ–ε диаграмме аустенитной стали Х17Н14М3Б (фиг. 7) четко прослеживается стадийность кривой течения [45], которая также количественно согласуется с экспериментальной зависимостью предела текучести от величины предварительной деформации [44].

Рассчитанные вероятности существования соответствующих мезосубструктур (фиг. 8) находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными по интервалам их существования на оси деформации и позволяют, с одной стороны, согласовать расчетную кривую течения с экспериментальной (темные точки на фиг. 7), а, с другой стороны, связаны с эволюцией среднего характерного размера соответствующей мезосубструктуры (фиг. 6). В областях с хорошо развитой ячеистой структурой начинает формироваться полосовая структура, а на фоне полосовой структуры образуется фрагментированная субструктура. Так ячеистая структура начинает формироваться, когда полная деформация достигает приблизительно 5%, для полосовой и фрагментированной мезосубструктур эти значения равны 15% и 45% соответственно (величины γ_j^p, в законе распределения имеют смысл степеней пластической

деформации, при которых начинается формирование той или иной мезосубструктуры). Значение λ (среднее $Mx = 1/\lambda$ и дисперсия $Dx = 1/\lambda^2$), с одной стороны, характеризует интервал существования соответствующей мезосубструктуры, а, с другой стороны, является параметром в зависимости для характерного размера неоднородностей.

Эволюция средних характерных размеров образующихся в ходе пластического деформирования мезосубструктур (фиг. 6) хорошо согласуется с экспериментами [43–46]. Так минимальный диаметр ячеек в данном случае оказывался равным приблизительно 0,2 мкм при начально наблюдаемом значении $d = 0{,}7$–$0{,}8$ мкм. Вместе с этим экспериментальные данные [42–44] дают кривую, хорошо аппроксимируемую экспоненциальной зависимостью как для диаметра ячеек от степени истинной деформации, так и для полосовой и блочной субструктур. Поэтому, скорость измельчения мезосубструктур в зависимости от пластической деформации фактически определяет в уравнении (31) вид функции распределения (30). Таким образом, текущий размер соответствующей мезосубструктуры L_j ($L_1 = d$, $L_2 = s$, $L_3 = l$) хорошо аппроксимируется той же самой экспоненциальной зависимостью, которой задаются функции плотностей вероятностей в (30):

$$L_j = K_j \lambda_j \exp[-\lambda_j(\gamma^p - \gamma^p_{j*})] + L_{j*} \qquad (32)$$

где K_j – масштабные коэффициенты, переводящие к принятой системе измерения соответствующей неоднородности (d – мкм, s – мкм, l – Å); L_{j*} – критический размер соответствующей неоднородности.

Итак, построено релаксационное определяющее уравнение (2), (3), (13), которое, в рамках феноменологического подхода, позволяет рассчитать сопротивление макрочастицы пластическому течению τ'_0 в зависимости от степени деформации. В модели учтены вклады, вносимые в кривую течения с микро- и мезоуровней в соответствии с формированием и эволюцией микро- и мезосубструктур.

Скорость изменения (измельчения) характерных размеров субструктур по мере нарастания степени деформации (32) определяет также скорость увеличения внутренних границ, а следовательно и соответствующее увеличение сопротивления материала сдвигу.

Модель является предсказательной. Если известна кривая течения с четко выраженной стадийностью, то ее представление с использованием (31) позволяет получить зависимости для размеров фрагментов мезосубструктур (32). И, наоборот, по известным зависимостям характерных размеров сформированных мезосубструктур от степени пластической деформации может быть восстановлен вид кривой течения.

Заключение. Развит подход, который позволяет моделировать упругопластическую деформацию нагружаемых материалов, принимая во внимание существенные особенности его внутреннего строения на разных структурных уровнях. Показана ключевая роль мезоуровня в развитии неоднородной пластической деформации и последующего разрушения материалов.

Обсужден один из возможных вариантов построения определяющего уравнения, учитывающего изменения внутренней микро- и мезоструктур и их вкладов в макроскопический деформационный процесс. Подобные определяющие уравнения могут быть эффективно использованы при решении различных задач прикладного характера.

В заключение, хочу поблагодарить сотрудников и аспирантов Института физики прочности и материаловедения СО РАН, принявших участие в выполнении расчетов: О.И. Черепанова, И.Ю. Смолина, Ю.П. Стефанова, Р.Р. Балохонова, В.А. Романову, В.Д. Шмика.

Работа была поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 96-01-00902).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Панин В.Е., Лихачев В.А., Гриняев Ю.В.* Структурные уровни деформации твердых тел. Новосибирск: Наука, 1985. 229 с.
2. *Панин В.Е.* Физические основы мезомеханики пластической деформации и разрушения твердых тел // Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука. 1995. Т. 1. С. 7–49.
3. *Макаров П.В.* Микродинамическая теория пластичности и разрушения структурно-неоднородных сред // Изв. вузов. Физика. 1992. Т. 35. № 4. С. 42–58.
4. *Панин В.Е., Коротаев А.Д., Макаров П.В., Кузнецов В.М.* Физическая мезомеханика материалов // Изв. вузов. Физика. 1998. Т. 41. № 9. С. 8–36.
5. *Panin V.E., Makarov P.V. et al.* Physical Mesomechanics of Heterogeneous Media and Computer-Aided Design of Materials / Ed. by V.E. Panin. Cambridge: Cambridge Intersci. Publ. 1998. 339 p.
6. *Панин В.Е.* Основы физической мезомеханики // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1. № 1. С. 5–22.
7. *Макаров П.В.* Подход физической мезомеханики к моделированию процессов деформации и разрушения // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1. № 1. С. 61–81.
8. *Коротаев А.Д., Тюменцев А.Н., Пинжин Ю.П.* Активация и характерные типы дефектных субструктур мезоуровня пластического течения высокопрочных материалов // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1. № 1. С. 23–35.
9. *Панин В.Е.* Современные проблемы пластичности и прочности твердых тел // Изв. вузов. Физика. 1998. Т. 41. № 1. С. 7–34.
10. *Коротаев А.Д., Тюменцев А.Н., Суховаров В.Ф.* Дисперсное упрочнение тугоплавких металлов. Новосибирск: Наука, 1989. 211 с.
11. *Shockey D.A.* Materials aspects of the adiabatic shear phenomena // Metallurgical Applications of Shock-Wave and High-Strain-Rate Phenomena. New York; Basel: M. Dekker, 1986. P. 633–656.
12. *Armstrong R.W., Zerilli F.J.* Dislocation mechanics aspects of plastic instability and shear banding // Mech. Mat. 1994. V. 17. P. 319–327.
13. *Рыбин В.В.* Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Металлургия. 1986. 223 с.
14. *Попов В.Л., Крёнер Э.* О роли масштабных уровней в теории упругопластичности // Физ. мезомеханика. 1998. Т. 1. № 1. С. 109–118.
15. *Kunin I.A.* Kinematics of media with continuously changing topology // Intern. J. Theor. Phys. 1990. V. 29. № 11. P. 1167–1176.
16. *Anthony K.-H., Azirhi A.* Dislocation dynamics by means of Lagrange formalism of irreversible processes: Coplex fields and deformation processes // Intern. J. Eng. Sci. 1995. V. 33. № 15. P. 2137–2148.
17. *Козлов Э.В., Конева Н.А.* Физическая природа стадийности пластической деформации. // Структурные уровни пластической деформации и разрушения // Под ред. В.Е. Панина. Новосибирск: Наука. 1990. С. 123–186.
18. *Мельников Г.П.* Системология и языковые аспекты кибернетики. М.: Сов. радио, 1978. 368 с.
19. *Панин В.Е., Макаров П.В., Немирович-Данченко М.М., Демидов В.Н., Смолин И.Ю., Черепанов О.И.* Методология компьютерного конструирования материалов с заданными характеристиками прочности // Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука. 1995. Т. 2. С. 5–76.
20. *Макаров П.В., Черепанов О.И., Демидов В.Н.* Математическая модель упругопластического деформирования мезообъема материала с ограниченным числом систем скольжения // Изв. вузов. Физика. 1995. Т. 38. № 11. С. 26–57.
21. *Макаров П.В., Бекетов К.А., Атаманов О.А., Кульков С.Н.* Вязкая конструкционная керамика: моделирование эволюции структуры мезообъема под нагрузкой // Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материалов. Новосибирск: Наука, 1995. Т. 2. С. 153–171.
22. *Zhou S.J., Lomdahl P.S., Thomson R., Holian B.L.* Dynamic crack processes via molecular dynamics // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76. № 13. P. 2318–2321.
23. *Holian B.L.* Modeling shock-wave deformation via molecular dynamics // Phys. Rev. A. 1988. V. 37. № 7. P. 2562–2568.
24. *Psakhie S.G., Korostelev S.Yu., Negreskul S.I., Zolnikov K.P., Wang Z., Li S.* Vortex mechanism of plastic deformation of grain boundaries. Computer simulation // Phys. Status. Solidi. B. 1993. V. 176. № 2. P. K41–K44.

25. *Макаров П.В.* Упругопластическое деформирование металлов волнами напряжений и эволюция дефектной структуры // Физика горения и взрыва. 1987. Т. 23. № 1. С. 22–28.
26. *Kelly J.M., Gillis P.P.* Continuum descriptions of dislocations under stress reversals // J. Appl. Phys. 1974. V. 45. № 3. P. 1091–1096.
27. *Balokhonov R.R., Makarov P.V., Romanova V.A.* Numerical simulation of ultrasonic surface treatment // J. Phys. IV. 1997. V. 7. № C3. P. 55–60.
28. *Makarov P.V., Romanova V.A., Balokhonov R.R.* Plastic deformation behavior of mild steel subjected to ultrasonic treatment // Theor. and App. Fract. Mech., 1997. V. 28. № 2. P. 141–146.
29. *Конева Н.А., Козлов Е.В.* Закономерности субструктурного упрочнения // Изв. вузов. Физика. 1991. Т. 34. № 3. С. 56–70.
30. *Пресняков А.А., Аубакирова Р.К.* К вопросу о скоростной чувствительности напряжений течения при растяжении // Физика металлов и металловедение. 1985. Т. 60. Вып. 1. С. 205–207.
31. *Champion A.R., Rohde R.W.* Hugoniot equation of state and the effect of shock stress amplitude and duration on the hardness of Hadfield steel // J. Appl. Phys. 1970. V. 41. № 5. P. 2213–2223.
32. *Wallace D.C.* Equation of state from weak shocks in solids // Phys. Review B. 1980. V. 22. № 4. P. 1495–1502.
33. *Jonson J.N., Barker L.M.* Dislocation dynamics and steady plastic wave profiles in 6061–T6 aluminum // J. Appl. Phys., 1969. V. 40. № 11. P. 4321–4334.
34. *Lipkin J., Asay J.R.* Reshock and release of shock-compressed 6061-T6 aluminum // J. Appl. Phys. 1977. V. 48. № 1. P. 182–189.
35. *Жукова Т.В., Макаров П.В., Скрипняк В.А. и др.* Особенности численного решения задачи о распространении волн нагружения в металлах с учетом релаксации // Инженерно-физический сборник: Томск: Изд-во Том. ун-та, 1987. С. 110–116.
36. *Глазырин В.П., Макаров П.В., Платова Т.М.* Расчет ударных волн в релаксирующей среде // Прикладные вопросы деформируемых тел. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1980. С. 14–18.
37. *Makarov P.V., Smolin I.Y., Prokopinsky I.P.* Localized plastic strain in polycrystalline materials with hole and notches // Theor. and Appl. Fracture Mechanics. 1998. V. 29. № 1. P. 11–20.
38. *Панин В.Е., Плешанов В.С.* Полосовые структуры на мезо- и макромасштабном уровнях при растяжении поликристаллов // Физическая мезомеханика и компьютерное конструирование материала. Новосибирск: Наука, 1995. Т. 1. С. 241–248.
39. *Panin V.E.* Physical mesomechanics of plastic deformation and experimental results obtained by optical methods // Japan. J. Appl. Phys. 1995. № 9. P. 888–894.
40. *Мурр Л.Е.* Влияние амплитуды, длительности импульса и повторного нагружения на структуру и свойства деформированных металлов и сплавов // Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / Под. ред. М.А. Мейерса и Л.Е. Мурра. М.: Металлургия, 1984. С. 260–276.
41. *Cherepanov O.I., Stefanov Y.P., Romanova V.A.* Calculation method and model of deformation of ceramic composite with allowance for accumulation of microdamages and fracture // Proc. of Intern. Workshop on New Models and Numerical Codes for Wave Processes in Condensed Media. Oxford. 1998. P. 891–897.
42. *Мурр Л.Е.* Микроструктура и механические свойства металлов и сплавов после нагружения ударными волнами // Ударные волны и явления высокоскоростной деформации металлов / Под. ред. М.А. Мейерса и Л.Е. Мурра. М.: Металлургия, 1984. С. 202–241.
43. *Корниенко Л.А., Чубенко Т.Ю., Савицкая Л.К., Линейцев В.Н., Сафонов В.А.* Развитие дислокационной структуры в монокристаллах аустенитной стали Х17Н14М3Б при прокатке // Изв. вузов. Физика. 1990. № 6. С. 94–101.
44. *Корниенко Л.А., Чубенко Т.Ю., Савицкая Л.К., Сафонов В.А., Тюменцев С.Н., Линейцев В.Н.* Термическая стабильность субструктур монокристаллов аустенитной стали Х17Н14М3Б на стадии развитой пластической деформации // Изв. вузов. Физика. 1991. Т. 34. № 3. С. 104–111.
45. *Рыбин В.В., Здолтаревский Н.Ю., Жуковский И.М.* Эволюция структуры и внутренние напряжения на стадии развитой пластической деформации кристаллических твердых тел // Физика металлов и металловедение. 1990. № 1. С. 5–27.

Томск

Поступила в редакцию
12.02.1999