

УДК 539.374

ОБОБЩЕНИЕ КРИТЕРИЯ МИЗЕСА НА МОНОКРИСТАЛЛЫ С ГЕКСАГОНАЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ

© 2019 г. А. М. Власова^{a,b,*}, А. Г. Кесарев^a

^a Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург, Россия

^b Уральский федеральный университет имени Первого Президента России Б.Н. Ельцина,
Екатеринбург, Россия

*e-mail: alisa@imp.uran.ru

Поступила в редакцию 24.01.2019 г.

После доработки 20.02.2019 г.

Принята к публикации 28.02.2019 г.

Получено естественное обобщение критерия текучести Мизеса с учетом анизотропии на монокристаллические материалы с гексагональной кристаллической решеткой. Поставлены краевые задачи для плоской деформации сжатием с противодействием, для одноосного растяжения, сжатия и для чистого сдвига. Рассмотрен частный случай решения краевых задач для гексагонального магния чистотой 99.9% при комнатной температуре. Определены значения коэффициентов, входящих в функцию текучести и их погрешности. Сопоставлены расчетные и экспериментальные данные $\sigma_{0.2\%}$ для монокристаллов магния различных ориентировок.

Ключевые слова: магний, пластичность, предел текучести, поверхность текучести, критерий Мизеса, жесткопластическая модель

DOI: 10.1134/S0572329919060126

1. Введение. Для гексагональной плотноупакованной (ГПУ) кристаллической решетки характерны низкая симметрия, большое число деформационных мод, и недостаточность легких мод для обеспечения произвольной пластической деформации (которых требуется не меньше пяти [1]). Все это приводит к сильной зависимости механических свойств от образующейся в ходе пластической деформации текстуры, и резкому изменению механических свойств, в частности, к появлению анизотропии. Широко используемые в практических расчетах критерии текучести Треска и Мизеса [2] при упомянутых условиях становятся неприменимыми. Требуется обобщение данных критериев, с применением новых подходов.

Для описания механических свойств материалов, в настоящее время используются различные физические теории пластичности [3], зачастую приводящие к сложным компьютерным расчетам (кроме простейшей модели Закса) на основе трудоемких экспериментов. Кроме того, они приводят к негладкой поверхности текучести, что создает значительные математические трудности. Модели, опирающиеся на закон Шмида, не всегда выполняются для ГПУ кристаллов, ввиду того, что для них двойникование – действующий и подавляющий механизм пластической деформации при комнатной температуре [4].

Предлагается построение простой модели для описания механических свойств ГПУ металлов, состоящий из трех этапов: 1) нахождение простого феноменологического критерия текучести отдельного монокристалла, 2) использование подходящей проце-

дуры усреднения по ориентировкам монокристаллов для описания свойств поликристалла с заданной текстурой, 3) описание эволюции текстуры.

Простота предложенной модели позволяет использовать для определения коэффициентов функции текучести меньшее число экспериментов, чем для моделей, основанных на законе Шмида и, в дальнейшем позволит построить простые модели поликристаллических ГПУ – материалов.

Целью данной работы явилось нахождение феноменологического критерия текучести гексагональных монокристаллов заданных ориентировок, позволяющего учесть анизотропию пределов текучести в различных направлениях, и при различных схемах нагружения. Постановка задачи и простейшие уравнения, описывающие частные случаи рассмотрены авторами ранее в [5]. Здесь поставлены краевые задачи для плоской деформации, одноосного растяжения и сжатия, чистого сдвига для ГПУ кристаллов, найдены их решения для монокристаллов магния при комнатной температуре. Определены коэффициенты, входящие в функцию текучести для магния при комнатной температуре, приводится оценка погрешностей коэффициентов и погрешностей аппроксимации. Результаты сопоставлены с экспериментальными данными.

2. Постановка задачи. Поскольку кристаллы с ГПУ решеткой относятся к классу симметрии $6/mmm$ [6], тогда естественным обобщением критерия Мизеса на данный случай является равенство нулю некоторого полинома $f(p_{i,j})$ зависящего от компонент тензора напряжений $p_{i,j}$ и инвариантного относительно точечной группы $6/mmm$. Полином выражается через скалярные инварианты первого и второго порядка симметрического тензора второго ранга, которые имеют вид [6]

$$p_{33}, \quad p_{11} + p_{22}, \quad 4p_{11}p_{22} - 4(p_{12})^2, \quad 4(p_{23})^2 + 4(p_{13})^2 \quad (2.1)$$

Удобнее рассматривать эквивалентные инварианты

$$I_p = p_{11} + p_{22} + p_{33}, \quad I_1 = (p_{13})^2 + (p_{23})^2, \quad I_2 = p_{33} - (p_{11} + p_{22})/2 \quad (2.2)$$

$$I_3 = (p_{11} + p_{22})^2 + 4[(p_{12})^2 - p_{11}p_{22}] = (p_{11} - p_{22})^2 + 4(p_{12})^2$$

Здесь $p_{i,j}$ – компоненты тензора напряжений в системе координат кристалла. Ось 3 (OZ) нормальна к базисной плоскости (0001), а оси 1 (OX) и 2 (OY) лежат в базисной плоскости, ортогональны и соответствуют направлениям $[1\ 1\ \bar{2}0]$ и $[1\ \bar{1}00]$. Выражения (2.2) имеют простой физический смысл: I_1 – это квадрат максимального напряжения сдвига, приложенного к базисной плоскости, I_2 – движущая сила сжатия/растяжения кристалла вдоль кристаллографической оси [0001]; I_3 отвечает за максимальную разность напряжений растяжения–сжатия, действующих в базисной плоскости. Материал при пластической деформации несжимаем [2], а так как инвариант I_p описывает гидростатическое давление, то он не может быть движущей силой пластической деформации и входит явно в $f(p_{i,j})$. Искомый критерий текучести будем искать в виде

$$f(p_{ij}) = a + kI_2 + I_1 + \alpha(I_2)^2 + \beta I_3 = 0 \quad (2.3)$$

где a, k, α, β – коэффициенты модели. В работе [7] для описания деформации анизотропного материала используют критерий Хилла [8]

$$F(p_{22} - p_{33})^2 + G(p_{33} - p_{11})^2 + H(p_{11} - p_{22})^2 + 2L(p_{23})^2 + 2M(p_{32})^2 + 2N(p_{12})^2 = 1 \quad (2.4)$$

от которого предлагаемый в данной работе критерий текучести отличается меньшим количеством независимых коэффициентов (благодаря учету группы симметрии) и наличием линейного члена, которого в критерии (2.4) нет, отражающего различие пределов текучести при сжатии и растяжении вдоль кристаллографической оси [0001],

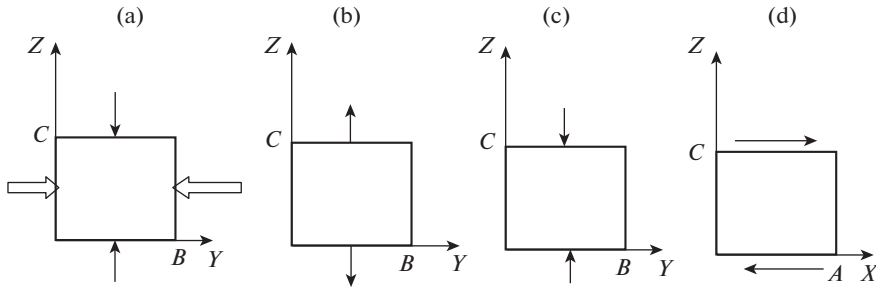


Рис. 1

обусловленное работой различных деформационных механизмов для этих двух случаев [4, 9].

Выражение (2.3) инвариантно относительно общей группы вращений на произвольный угол вокруг оси Z , и не учитывает анизотропию свойств в базисной плоскости. Коэффициенты a, k, α, β в (2.3), вообще говоря, зависят от гидростатического давления, температуры и химического состава, но здесь данный вопрос не рассматривается. Физический смысл постоянной a очевиден: положим в (2.3) критическое напряжение сдвига в базисной плоскости $p_{13} = p_b$, остальные $p_{ij} = 0$, тогда

$$(p_{13})^2 = (p_b)^2 = -a \quad (2.5)$$

Известно [2], что пластическое течение материала при медленном, квазиравновесном течении описывается уравнениями

$$\nabla_i P_{ij} = 0, \quad e_{ii} = 0, \quad f(P_{ij}) = 0, \quad e_{ij} = \dot{\theta}(t) \frac{\partial f(P_{ij})}{\partial P_{ij}}, \quad e_{ij} = 0.5(\nabla_i v_j + \nabla_j v_i) \quad (2.6)$$

Здесь первое уравнение – условие равновесия, второе – условие несжимаемости, третье – равенство нулю функции текучести, описывающей поверхность текучести, четвертое – ассоциированный закон; e_{ij} – тензор скоростей деформации, v_i – скорость вещества в данной точке, $\theta(t)$ – произвольная функция времени.

Для математического описания плоской деформации, осуществленной экспериментально в [4, 9–11], рассмотрим прямоугольный параллелепипед размерами $A \times B \times C$ с ребрами, параллельными осям лабораторной системы координат OX, OY и OZ , соответственно (рис. 1,а). Положим, что нормальная компонента скорости на верхней поверхности параллелепипеда направлена вниз, на нижней грани и двух боковых нормальные компоненты скорости равны нулю, силами трения пренебрегаем, и касательные компоненты равны нулю. На плоскостях, параллельных YOZ , напряжения равны нулю, накладываются следующие краевые условия

$$v_z = 0, \quad P_{xz} = 0, \quad P_{yz} = 0 \quad \text{при} \quad Z = 0; \quad v_z = v_0, \quad P_{xz} = P_{yz} = 0, \quad \text{при} \quad Z = C \quad (2.7)$$

$$v_y = 0, \quad P_{yx} = 0, \quad P_{yz} = 0 \quad \text{при} \quad Y = 0 \quad \text{и} \quad v_y = 0, \quad P_{yx} = 0, \quad P_{yz} = 0 \quad \text{при} \quad Y = B \quad (2.8)$$

$$P_{xi} = 0, \quad i = x, y, z \quad \text{при} \quad X = 0 \quad \text{и} \quad X = A \quad (2.9)$$

Краевая задача (2.2), (2.3), (2.6)–(2.9) описывает плоскую деформацию (рис. 1,а). Тонкой стрелкой на рис. 1 обозначены приложенные силы, а толстой – ограничения.

Большой научный и практический интерес представляет также свободное растяжение (рис. 1,б) и свободное сжатие (рис. 1,с) монокристаллов. Экспериментально

проведены испытания [0001]-монокристаллов магния на сжатие [12, 13], $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ -монокристаллов на растяжение [14], теоретически исследуется сжатие и растяжение [0001]-монокристаллов [15]. Свободному растяжению (рис. 1,b) и сжатию (рис. 1,c) соответствует краевая задача (2.2), (2.3), (2.6), (2.7), (2.9), (2.10).

$$P_{yi} = 0, \quad i = x, y, z, \quad \text{при } Y = 0 \quad \text{и} \quad Y = B \quad (2.10)$$

Предполагая, что сдвиг происходит в направлении оси OX (рис. 1,d), находим условия

$$v_x = 0, \quad P_{zz} = 0, \quad P_{yz} = 0, \quad \text{при } Z = 0; \quad v_x = v_0, \quad P_{zz} = P_{yz} = 0, \quad \text{при } Z = C \quad (2.11)$$

Краевая задача (2.2), (2.3), (2.6), (2.7), (2.9)–(2.11) искомая краевая задача для деформации сдвигом (рис. 1,d).

Для определения условий начала пластической деформации, ограничимся определением тензора напряжений, а тензор деформации вычислять не будем, поскольку для малых времен он не представляет большого интереса, а для больших – не имеет смысла в рамках данной модели из-за резкого изменения прочностных свойств магния при деформации. Краевые условия во всех рассматриваемых краевых задачах можно удовлетворить, полагая тензоры напряжений и деформаций не зависящими от координат

$$P_{ij}(\mathbf{r}, t) = P_{ij}, \quad e_{ij}(\mathbf{r}, t) = e_{ij} \quad (2.12)$$

3. Метод решения. 3.1. *Краевая задача для плоской деформации гексагонального кристалла.* Тензор напряжений \mathbf{p} ищем в виде

$$\mathbf{p} = -R\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_2 - P\mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \quad (3.1)$$

Краевые условия для касательных напряжений (2.9), (2.10) для (3.1), очевидно, выполняются, условия на скорость (2.11) могут быть удовлетворены выбором функции $\dot{\theta}(t)$. В силу краевых условий (2.8), (2.9), R – это напряжение реакции боковых стенок канала, P – напряжение, приложенное к торцам ($Z = 0$, $Z = C$) соответственно (рис. 1,a).

Ориентировка монокристалла относительно лабораторной системы координат описывается углами Эйлера. Пусть оси кристаллита X , Y , Z . Последовательно поворачивая его вокруг OZ на угол φ_1 , вокруг оси X' на угол Φ , затем вокруг оси Z'' на угол φ_2 задаем новую ориентировку [16], оси которой мы обозначили выше индексами 1, 2 и 3 (рис. 2). Ввиду цилиндрической симметрии относительно оси 3, параллельной кристаллографическому направлению [0001], положение решетки в лабораторной системе координат описывается двумя углами (φ_1 , Φ). В работе [5] использовались обозначения из [17]. Здесь, согласно [18], векторы ортогонального базиса системы координат, связанной с кристаллом, задаются через лабораторный базис в виде $(\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{n}) = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)T$, где матрица перехода от лабораторной системы к системе координат, связанной с кристаллом

$$T = \begin{pmatrix} \cos \varphi_1 & -\sin \varphi_1 \cos \Phi & -\sin \varphi_1 \sin \Phi \\ \sin \varphi_1 & \cos \varphi_1 \cos \Phi & \cos \varphi_1 \sin \Phi \\ 0 & -\sin \Phi & \cos \Phi \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Тогда векторы лабораторной системы координат выражаются через базис, связанный с кристаллом посредством $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) = (\mathbf{l}, \mathbf{m}, \mathbf{n})T^{-1}$, где $T^{-1} = T^T$ ввиду ортогональности преобразования. В развернутом виде компоненты тензора

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \cos \varphi_1 \mathbf{l} - \sin \varphi_1 \cos \Phi \mathbf{m} - \sin \varphi_1 \sin \Phi \mathbf{n} \\ \mathbf{e}_2 &= \sin \varphi_1 \mathbf{l} + \cos \varphi_1 \cos \Phi \mathbf{m} + \cos \varphi_1 \sin \Phi \mathbf{n} \\ \mathbf{e}_3 &= -\sin \Phi \mathbf{m} + \cos \Phi \mathbf{n} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Подставляя компоненты тензора (3.4) в критерий (2.3), получаем уравнение

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{2}\{k + \alpha[R(1 - 3\cos^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi) + P(1 - 3\cos^2 \Phi)]\}(1 - 3\cos^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi) + \\
 & + 2\beta[P \sin^2 \Phi - R \sin^2 \varphi_1 + R \cos^2 \varphi_1 \cos^2 \Phi](\sin^2 \varphi_1 - \cos^2 \varphi_1 \cos^2 \Phi) - \\
 & - 2\beta R \sin^2 2\varphi_1 \cos^2 \Phi - 2\cos^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi [R(1 - \cos^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi) - P \cos^2 \Phi] = 0
 \end{aligned} \quad (3.7)$$

а из условия (3.5) с учетом (3.6) – уравнение

$$\begin{aligned}
 & a + k \left[\frac{R}{2}(1 - 3\cos^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi) + \frac{P}{2}(1 - 3\cos^2 \Phi) \right] + \frac{1}{4}[R^2 \sin^2 2\varphi_1 \sin^2 \Phi + \\
 & + \sin^2 2\Phi(R \cos^2 \varphi_1 - P)^2] + \alpha \left[\frac{R}{2}(1 - 3\cos^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi) + \frac{P}{2}(1 - 3\cos^2 \Phi) \right]^2 + \\
 & + \beta \{ [R(\sin^2 \varphi_1 + \cos^2 \varphi_1 \cos^2 \Phi) + P \sin^2 \Phi]^2 - 4PR \sin^2 \varphi_1 \sin^2 \Phi \} = 0.
 \end{aligned} \quad (3.8)$$

Система уравнений (3.7), (3.8) позволяет определить критическое напряжение в задаче плоской деформации.

3.2. Краевая задача для одноосного растяжения и сжатия гексагонального кристалла. Примем за p_c и p_t критические сжимающие и растягивающие напряжения соответственно, тогда тензор напряжений p будем искать в виде

$$p = -p_c \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \quad \text{либо} \quad p = p_t \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_3 \quad (3.9)$$

Подставляя (3.3) в (3.9), а результат – в (2.2) и критерий текучести (2.3), аналогично задаче плоской деформации находим решение для одноосного сжатия (растяжения)

$$\left[\beta \sin^4 \Phi + 0.25 \sin^2 2\Phi + \frac{\alpha}{4}(1 - 3\cos^2 \Phi)^2 \right] P^2 + \frac{k}{2}(1 - 3\cos^2 \Phi)P + a = 0 \quad (3.10)$$

при этом $p_t < 0$, $p_c > 0$. Уравнение (3.10) получается из (3.7) при $R = 0$.

3.3. Краевая задача для чистого сдвига гексагонального кристалла

$$p = p(\mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_1) \quad (3.11)$$

Подставляя выражения (3.3) в (3.10), находим

$$\begin{aligned}
 f(p_{ij}) = a - \frac{3p}{2} \sin \varphi_1 \sin 2\Phi + \frac{9\alpha}{4} p^2 \sin^2 \varphi_1 \sin^2 2\Phi + 4\beta p^2 \sin^2 \Phi \times \\
 \times (\cos^2 \varphi_1 + \sin^2 \varphi_1 \cos^2 \Phi) + p^2 (\cos^2 \Phi \cos^2 \varphi_1 + \sin^2 \varphi_1 \cos^2 2\Phi) = 0
 \end{aligned} \quad (3.12)$$

3.4. Частные решения краевых задач в общем виде. Мы обозначаем деформационные схемы, так, как это принято в [9], где A и B – сжатие вдоль $[0001]$ с противодействием в направлении $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ и $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ соответственно, C и E – сжатие вдоль $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ с противодействием в направлении $[0001]$ и $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ соответственно, D и F – сжатие вдоль $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ с противодействием в направлении $[0001]$ и $\langle 10\bar{1}0 \rangle$ соответственно, G – сжатие вдоль направления под углом $\Phi = \pi$ с противодействием в направлении $\langle 10\bar{1}0 \rangle$. Одноосное растяжение в направлении $\langle 11\bar{2}0 \rangle$ обозначено в работе как схема tx , свободное одноосное сжатие и растяжение вдоль $[0001]$ обозначается cz и tz соответственно. Статистическая обработка данных экспериментальных деформационных кривых из [9, 14, 19] проведена с доверительной вероятностью 0.95 и коэффициентом Стьюдента 2.8 и 3.2. Исходные эмпирические данные будут приведены в табл. 2 вместе с результатами расчетов согласно построенной модели.

Ввиду цилиндрической симметрии критерия текучести, схемы A и B , C и D , E и F неразличимы, и в данной работе рассматриваются усредненные схемы AB , CD , EF .

Таблица 1

Коэфф.	λ	μ	ε	a	α	β	k
$\delta, \%$	1.32	4.94×10^{-2}	3.49×10^{-5}	-0.28	7.07×10^{-4}	5.36×10^{-4}	6.37×10^{-2}
	12.3	25.9	20.5	20	46.4	58.7	48.6

Таблица 2

Схема нагружения, i	$p_i^{\varepsilon}, \text{ МПа}$	$p_i^p, \text{ МПа}$	$\Delta p_i^{\varepsilon}, \text{ МПа}$	$\Delta p_i^p, \text{ МПа}$	$\sum \Delta p_i^{\varepsilon} + \Delta p_i^p, \text{ МПа}$	$ p_i^p - p_i^{\varepsilon} , \text{ МПа}$
<i>A</i>	94.24 [9]	102.03	2.13	4.38	6.51	7.74
<i>B</i>	110.28 [9]	102.03	1.86	4.38	6.24	8.23
<i>C</i>	63.73 [9]	56.63	4.17	30.07	34.24	7.07
<i>D</i>	43.28 [9]	56.63	0.81	30.07	30.88	13.31
<i>E</i>	10.67 [9]	11.80	2.74	2.38	5.12	1.16
<i>F</i>	13.46 [9]	11.80	1.7	2.38	4.08	1.64
<i>G</i>	2.68 [9]	1.6	0.59	0.62	1.21	1.08
<i>tx</i>	91.66 [14]	52.28	1.54	6.48	8.02	39.38
<i>bm</i>	0.5 [19]	0.533	0.05	0.05	0.10	0.03
<i>cz</i>	110.3*	94.45	—	1.98	1.98	15.85
<i>tz</i>	15.5*	4.25	—	1.14	1.14	11.25

* – теоретические данные [15].

Пределы текучести для усредненных схем принимаются как среднее $\sigma_{0.2}^{AB} = p_{AB} = (\sigma_{0.2}^A + \sigma_{0.2}^B)/2$, $\sigma_{0.2}^{CD} = p_{CD} = (\sigma_{0.2}^C + \sigma_{0.2}^D)/2$, $\sigma_{0.2}^{EF} = p_{EF} = (\sigma_{0.2}^E + \sigma_{0.2}^F)/2$.

Введем безразмерные переменные Q и коэффициенты $\mu, \lambda, \varepsilon$ для удобства решения и анализа

$$Q = \frac{\alpha}{k} p, \quad \mu = \frac{\varepsilon}{\alpha}, \quad \lambda = \frac{\alpha}{\beta}, \quad \varepsilon = \left(\frac{\alpha}{k}\right)^2 \cdot |a| \ll 1 \quad (3.13)$$

Решая систему уравнений (3.7), (3.8), при $\Phi = 0^\circ$, $\varphi_1 = 0^\circ$, а также при $\Phi = 90^\circ$, $\varphi_1 = 90^\circ$ находим, что критические напряжения Q для плоской деформации по усредненным схемам *AB* и *EF* описываются одним уравнением

$$Q^2 - Q - \lambda/16 - \mu\lambda/4 - \mu = 0 \quad (3.14)$$

причем

$$Q_{AB} = \frac{1 + \sqrt{1 + \lambda/4 + \mu\lambda + 4\mu}}{2} > 0 \quad (3.15)$$

$$-Q_{EF} = \frac{1 - \sqrt{1 + \lambda/4 + \mu\lambda + 4\mu}}{2} < 0 \quad (3.16)$$

Решая систему уравнений (3.7), (3.8) при $\Phi = 90^\circ$, $\varphi_1 = 0^\circ$ получаем решение p_{CD} для краевой задачи плоской деформации по схеме CD

$$p_{CD}^2 = \frac{1}{\beta} \left(\frac{k^2}{4\alpha} - a \right) \quad (3.17)$$

Или в безразмерной форме

$$Q_{CD} = \sqrt{\lambda(0.25 + \mu)} \quad (3.18)$$

Решая уравнение (3.10) при $\Phi = 90^\circ$, $\varphi_1 = 90^\circ$ получаем напряжение Q_{ix} свободного растяжения вдоль OX

$$Q_{ix} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4\mu(1 + 4/\lambda)}}{1 + 4/\lambda} \quad (3.19)$$

Критические напряжения сжатия p_{cz} и растяжения p_{tz} вдоль Z находятся как абсолютная величина корней уравнения (3.10) при $\Phi = 0^\circ$ и любого φ_1

$$p_{cz} = \frac{k}{\alpha} Q_{cz}, \quad p_{tz} = \frac{k}{\alpha} Q_{tz}, \quad Q_{cz} = \frac{1 + \sqrt{1 + 4\mu}}{2}, \quad Q_{tz} = \frac{\sqrt{1 + 4\mu} - 1}{2} \quad (3.20)$$

Из (3.14) и формул Виета следует связь между Q_{AB} и Q_{EF}

$$Q_{AB} - Q_{EF} = 1, \quad Q_{AB}Q_{EF} = \lambda/16 + \mu\lambda/4 + \mu \quad (3.21)$$

Аналогично получаем взаимосвязь между Q_{CZ} и Q_{TZ}

$$Q_{cz} - Q_{tz} = 1, \quad Q_{cz}Q_{tz} = \mu \quad (3.22)$$

Из (3.21), (3.22) и (3.13) следует связь между напряжениями текучести для 4 схем в исходных переменных

$$p_{cz} - p_{tz} = p_{AB} - p_{EF} = k/\alpha = p_{ABEF} \quad (3.23)$$

Кроме того, из формул (3.18), (3.21), (3.22) находим

$$Q_{AB}Q_{EF} - Q_{CD}^2/4 = Q_{cz}Q_{tz} = \mu, \quad p_{AB}p_{EF} - p_{CD}^2/4 = p_{cz}p_{tz} \quad (3.24)$$

Величины p_{AB} , p_{EF} , p_{CD} , p_{cz} , p_{tz} выбраны положительными, ввиду физического смысла напряжений текучести. Нетрудно видеть, что неотрицательными являются Q_i и коэффициенты μ и λ .

3.5. *Оценки коэффициентов критерия текучести для чистого магния.* Критическое напряжение сдвига в базисной плоскости p_{bm} соответствует ориентировке с максимальным фактором Шмида. Тогда напряжение течения $p_b = p_{bm}/\cos\psi$, где ψ – угол с ближайшим направлением базисного скольжения $\psi \in [0, 30^\circ]$, следовательно, максимальное p_{bM} критическое напряжение сдвига в базисной плоскости

$$p_{bM} = 2p_{bm}/\sqrt{3} \quad (3.25)$$

Выберем $p_b = p_{bs}$, требуя минимума среднего квадрата относительной погрешности p_b

$$p_{bs} = \left(\frac{p_b - p_{bM}}{p_{bM}} \right)^2 + \left(\frac{p_b - p_{bm}}{p_{bm}} \right)^2 \rightarrow \min \quad (3.26)$$

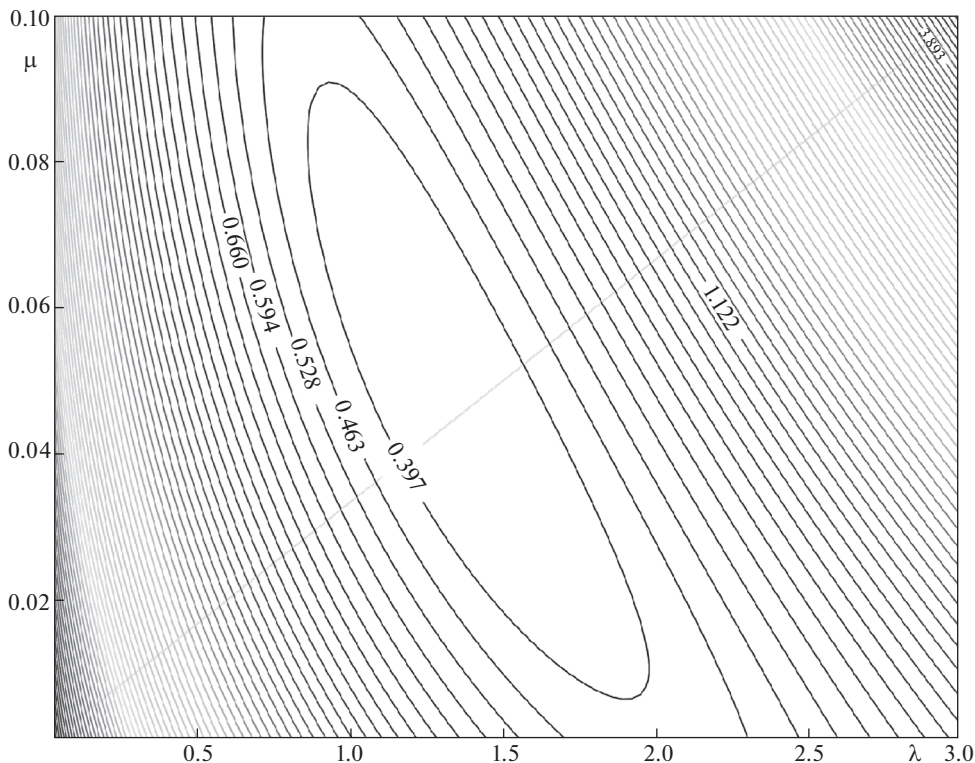


Рис. 3

Дифференцируя (3.26) по p_b и приравнявая производную к нулю, находим

$$p_{bs} = p_{bM} p_{bm} \frac{p_{bM} + p_{bm}}{(p_{bM})^2 + (p_{bm})^2} = \frac{1/p_{bM} + \sqrt{3}/(2p_{bm})}{1/(p_{bm})^2 + 3/(2p_{bm})^2} = \frac{4 + 2\sqrt{3}}{7} p_m \quad (3.27)$$

Поскольку анизотропия $\sigma_{0,2\%}$ для различных ориентировок различается на два порядка, то минимизация среднеквадратичной абсолютной погрешности не имеет смысла. Естественным путем нахождения коэффициентов λ, μ будет минимизация среднего квадрата относительной погрешности целевой функции, что может рассматриваться разновидностью метода наименьших квадратов с введением весовых коэффициентов $1/p_i$, где $p_i^{i \in \{A,B,C,D,T,F,tx\}}$ – измеренные значения соответствующих напряжений текучести.

Целевую функцию U запишем в виде

$$U = \sum_{i \in \{A,B,C,D,E,F,tx\}} \{[Q_i(\lambda, \mu) - Q_{i0}]/Q_{i0}\}^2 \quad (3.28)$$

что представляет собой средний квадрат относительной погрешности. Здесь Q_{i0} – безразмерные пределы текучести, взятые из экспериментальных $\sigma_{0,2}^{i \in \{A,B,C,D,E,F,tx\}}$, путем умножения на (3.23), а $Q_i(\lambda, \mu)$ – соответствующие значения Q_i , вычисленные на основе выбранных значений параметров λ, μ по формулам (3.15), (3.16), (3.18), (3.19).

Минимизация целевой функции (3.28) с использованием функции `fminsearch` (Octave 4.0.0) дает хорошую сходимость. На рис. 3 приведены линии уровня целевой функции (3.28) в области $\mu \in [0, 0.1]$, $\lambda \in [0, 3]$.

Исходя из значений p_{bs} , p_{ABEF} , λ , μ коэффициенты критерия определяются по формулам

$$a = -(p_{bs})^2, \quad \varepsilon = \frac{p_b^2}{p_{ABEF}}, \quad \alpha = \varepsilon/\mu, \quad \beta = \varepsilon/(\mu\lambda), \quad k = \alpha p_{ABEF} \quad (3.29)$$

Определение погрешностей коэффициентов λ, μ проводилось путем [20] минимизации целевой функции (3.28) для 100 различных наборов исходных данных, на которые налагались возмущения, распределенные по нормальному закону с дисперсиями DQ_i , где $i \in \{A, B, C, D, E, F, tx\}$. Дисперсии $D\lambda$ и $D\mu$ получены как квадрат стандарта выборки из 100 полученных таким образом λ и μ . Ввиду (3.29) $\varepsilon = f(p_{bs}, p_{ABEF})$, при этом p_{ABEF} и p_{bs} являются независимыми [21] (экспериментальные данные), поэтому погрешность $\delta\varepsilon$ равна

$$\delta\varepsilon = 2\sqrt{(\delta p_{bm})^2 + (\delta p_{ABEF})^2} \quad (3.30)$$

$$\delta^2 p_{ABEF} = \frac{t^2(s^2 p_A + s^2 p_B + s^2 p_E + s^2 p_F)}{5(p_A + p_B - p_E - p_F)^2} \quad (3.31)$$

где $s^2 p_i$ – квадрат стандарта соответствующей выборки, t – коэффициент Стьюдента.

Так как остальные коэффициенты (3.29) выражаются через ε , p_{ABEF} и коэффициенты λ, μ которые, в свою очередь сложным образом зависят от исходных данных, то относительные погрешности $\delta\alpha$, $\delta\beta$, δk , δa других коэффициентов выражаются как

$$\delta\alpha = \delta\varepsilon + \delta\mu, \quad \delta\beta = \delta\varepsilon + \delta\mu + \delta\lambda, \quad \delta k = \delta\varepsilon + \delta\mu + \delta p_{ABEF}, \quad \delta a = 2\delta p_{bm} \quad (3.32)$$

Значения коэффициентов μ , λ , ε , a , α , β , k и их погрешностей δ_i приводятся в табл. 1.

3.6. Верификация модели. По формулам (3.15)–(3.17), (3.19) рассчитаны значения напряжений текучести для схем, которые использовались при построении модели p_{AB} , p_{CD} , p_{EF} , p_{tx} , а также схем p_G , p_{tz} , p_{cz} .

Напряжения для сжатия с боковым противодействием по схеме G равны и описываются уравнениями (3.7), (3.8), которые при $\Phi = \pi/3$, $R = 0$ дают

$$p_G = \sqrt{\frac{k^2}{\alpha + 4\beta} - 4a} \quad (3.33)$$

Свободное сжатие (растяжение) вдоль [0001] описывается уравнением (3.10) при $\Phi = 0$, которое дает

$$a - kp_{cz,tz} + \alpha p_{cz,tz}^2 = 0 \quad (3.34)$$

Определим погрешности нахождения напряжений текучести для каждой из схем.

Так, дифференцируя уравнение (3.14), находим

$$dQ_{AB,EF} = \frac{(1/16 + \mu/4) d\lambda + (\lambda/4 + 1) d\mu}{|2Q_{AB,EF} - 1|} \quad (3.35)$$

откуда относительные погрешности $\delta Q_{AB,EF}$ выражаются как

$$\delta Q_{AB,EF} = \frac{(1/16 + \mu/4)\lambda\delta\lambda + (\lambda/4 + 1)\mu\delta\mu}{|2Q_{AB} - 1|Q_{AB,EF}} \quad (3.36)$$

Аналогично определяются относительные погрешности для других схем.

Выражения для относительной погрешности рассчитанных критических напряжений различных схем p_i имеют вид

$$\delta p_i = \delta Q_i + \delta p_{ABEF} \quad (3.37)$$

Введем абсолютные погрешности измерения Δp_i^3 , расчета Δp_i^p , аппроксимации $|p_i^p - p_i^3|$, суммарную погрешность измерения и расчета $\sum \Delta p_i^3 + \Delta p_i^p$ напряжений текучести для схем i , результаты расчетов p_i^p вместе с экспериментальными значениями напряжений p_i^3 приводятся в табл. 2.

Анализ результатов. Из пределов текучести $\sigma_{0,2\%}$ и $\sigma_{1\%}$ [11] приняты в качестве феноменологических значений, используемых при построении модели, $\sigma_{0,2}$ с минимальным значением остаточной пластической деформации, чтоб минимизировать упрочнение и исключить все моды, кроме включающейся сразу. Имеется значительный разброс (0.46–0.81 МПа) [19, 22, 23] для величины критического напряжения сдвига P_b в базисной плоскости, в данной работе используются только данные из [19].

При $\beta \rightarrow \infty$ и фиксированных остальных коэффициентах, из (3.13) следует, что $\lambda \rightarrow 0$, тогда, используя решения (3.15)–(3.17), (3.19) легко показать, что

$$p_{AB} \rightarrow p_{cz}, \quad p_{EF} \rightarrow p_{tz}, \quad p_{CD} \rightarrow 0, \quad p_{tx} \rightarrow 0 \quad (3.38)$$

При $\beta \rightarrow 0$ и фиксированных остальных параметрах, из (3.13) следует: $\lambda \rightarrow \infty$, из (3.15)–(3.17) следует, что p_{AB} , p_{EF} , p_{CD} неограниченно возрастают, из (3.19) и (3.34) легко видеть, что при $\beta \rightarrow 0$

$$p_{tx} \rightarrow 2p_{cz} \quad (3.39)$$

Таким образом, β как коэффициент перед инвариантом I_3 , характеризует способность системы совершать плоскую деформацию в базисной плоскости. При отсутствии вклада скольжения в базисной плоскости ($\beta = 0$) невозможны деформации по схемам AB , CD , EF , а свободное растяжение вдоль оси OX требует усилия вдвое большего, чем при свободном сжатии в перпендикулярном направлении, так как, по-видимому, в обоих случаях происходит сжатие вдоль оси OZ , но во втором случае растяжение идет одинаково в двух взаимно перпендикулярных направлениях (OX , OY), что легче, чем когда растяжение идет только в одном направлении.

Сравнение погрешностей аппроксимации с суммарной погрешностью (табл. 2) показывает, что для схем C , D погрешность аппроксимации значительно меньше суммарной; для схем A , B , E , F , G они одного порядка, и хуже всего аппроксимируется схемы tx . К сожалению, эмпирические данные для построения модели взяты из различных работ, состав размеры образцов, условия их получения и концентрация дефектов, внесенных при механической обработке для них различаются, что влечет изменение их механических свойств. Наличие между стенками канала и образцом силы трения при плоской деформации, сжатии и отсутствие ее при растяжении также является источником ошибок. С целью минимизации ошибок, обусловленных различием свойств, нужны, по-видимому, работы по проведению экспериментов над монокристаллами, выращенными в одинаковых условиях.

Теоретико-групповой подход показывает, что ограничиваясь полиномами второй степени улучшить данный критерий текучести нельзя. Такой критерий приводит к за-

мене гексагональной системы цилиндрической, что не позволяет различить схемы нагружения A и B , C и D , E и F соответственно. Больше всего различаются критерии текучести для схем C и D . Наилучшее приближение этих значений одним (наименьшая относительная погрешность) находится из условия

$$\frac{p_C - p'_{CD}}{p_C} = \frac{p'_{CD} - p_D}{p_D} \quad (3.40)$$

где p'_{CD} – это значение напряжений, которое дает минимальную относительную погрешность. Из (3.40) следует

$$p'_{CD} = \frac{2p_C p_D}{p_C + p_D}, \quad \delta p'_{CD} = \frac{p_C - p_D}{p_C + p_D} \quad (3.41)$$

И величина относительной погрешности $\delta p'_{CD}$ составляет 19.1%, значит подход, основанный на полиномах второго порядка, не позволяет получить большую точность. В нашей предыдущей работе [5] была показана хорошая аппроксимация в области, где действующей модой является базисное скольжение, а в работе [24] показано, что при растяжении и сжатии эта область является преобладающей.

Благодаря сильной анизотропии пределов текучести монокристаллов магния, поликристалл магния с хаотической ориентировкой зерен должен демонстрировать сложное композитоподобное поведение, которое объясняет многие его свойства, в частности, большое различие пределов текучести у литого (20 МПа), деформированного (186 МПа) и для отожженного (98 МПа) состояний. Предложенный критерий текучести можно применять к кристаллам любых гексагональных металлов, используя эмпирические данные для $\sigma_{0.2\%}$ требуемого металла, при этом коэффициенты модели будут отличаться от рассчитанных в данной работе. Используя усреднение по ориентировкам кристаллитов можно получить оценки для напряжений текучести текстурированных ГПУ металлов.

Заключение. Предложен наиболее общий критерий текучести, согласующийся с гексагональной симметрией. В отличие от критерия Хилла, предложенный критерий учитывает как основную анизотропию монокристалла магния, связанную с его ориентировкой, так и различие пределов текучести при сжатии и растяжении вдоль этой оси. Показано, что критерии, основанные на полиномах второго порядка, не позволяют учесть анизотропию, связанную с вращением вокруг гексагональной оси. На основе предложенной модели определены пределы текучести для ряда простых схем нагружения, встречающихся в экспериментальных работах, установлены связи между ними. На основе данных, имеющихся в литературе, найдены коэффициенты критерия для случая магния чистотой 99.9% при комнатной температуре, оценены их погрешности, полученные решения сопоставлены с экспериментальными данными. При помощи критерия, основанного на полиномах второго порядка погрешность, по-видимому, не может быть получена менее, чем 19%.

Работа выполнена в рамках государственного задания по теме “Давление” № АААА-А18-118020190104-3.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Полухин П.И., Горелик С.С., Воронцов В.К. Физические основы пластической деформации. М.: Металлургия, 1982. 584 с.
2. Седов Л.И. Механика сплошной среды, Т.2. М.: Наука, 1994. 560 с.
3. Трусов П.В., Волегов П.С., Кондратьев Н.С. Физические теории пластичности. Пермь: Издательство пермского национального исследовательского политехнического университета, 2013. 244 с.

4. *Wonsiewicz B.C., Backofen W.A.* Plasticity of magnesium crystals // *Trans AIME*. 1967. V. 239. P. 1422–1431.
5. *Власова А. М., Кесарев А. Г.* Модель деформации монокристаллического магния // *Известия вузов. Физика*. 2018. Т. 61. № 7. С. 68–78.
6. *Теодосиу К.* Упругие модели дефектов в кристаллах. М.: Мир, 1985. 352 с.
7. *Loginov Yu.N., Solovei V.D., Kotov V.V.* Transformation of the yielding condition during the deformation of HCP metallic materials // *Russian metallurgy (Metally)*. 2010. V. 2010. № 3. P. 235–240.
8. *Хилл Р.* Математическая теория пластичности. М.: Гостехиздат, 1956. 408 с.
9. *Kelly E.W., Hosford W.F.* Plane-strain compression of magnesium and magnesium alloy crystals // *Transactions of the metallurgical society of AIME*. 1968. V. 242. P. 5–13.
10. *Molodov K.D., Al-Samman T., Molodov D.A.* On the diversity of the plastic response of magnesium in plane strain compression // *Materials Science & Engineering A*. 2016. V. 651. P. 63–68.
11. *Chapius A., Driver J.H.* Temperature dependency of slip and twinning in plane strain compressed magnesium single crystals // *Acta Materialia*. 2011. V. 59. P. 1986–1994.
12. *Obara T., Yoshinaga H., Morozumy S.* $\{11\bar{2}2\}\langle\bar{1}\bar{1}23\rangle$ slip system in magnesium // *Acta metallurgica*. 1973. V. 21. P. 845–853.
13. *Yoshinaga H., Horiuchi R.* Deformation mechanisms in magnesium single crystals compressed in the direction parallel to hexagonal axis // *Trans. JIM*. 1963. V. 4. P. 1–8.
14. *Tonda H., Ando S.* Effect of Temperature and Shear Direction on Yield Stress by $\{11\bar{2}2\}\langle\bar{1}\bar{1}23\rangle$ Slip in HCP Metals // *Met. and Mater. Transactions A*. 2002. V. 32 A. P. 831–836.
15. *Zhang J., Joshi S.P.* Phenomenological crystal plasticity modeling and detailed micromechanical investigations of pure magnesium // *J. Mech. Phys. Solids*. 2012. V. 60. P. 945–972.
16. *Уманский Я. С., Скаков Ю. А., Иванов А. Н., Расторгуев Л. Н.* Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. М.: Металлургия, 1982. 631 с.
17. *Курош А. Г.* Курс высшей алгебры. М.: Государственное издательство физ.-мат. литературы, 1962. 431 с.
18. *Федорчук В. В.* Курс аналитической геометрии и линейной алгебры. М.: Издательство Московского Государственного Университета, 1990. 328 с.
19. *Shelly W. F., Nash R.R.* Mechanical Properties of Magnesium Monocrystals // *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*. 1960. V. 218. P. 416–423.
20. *Калиткин Н. Н.* Численные методы. СПб: БХВ – Петербург, 2011. 586 с.
21. *Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М.* Численные методы. М.: Лаборатория Базовых Знаний, 2001. 632 с.
22. *Hutchinson W.B., Barnett M.R.* Effective values of critical resolved shear stress for slip in polycrystalline magnesium and other hcp metals // *Scripta Materialia*. 2010. V. 63. P. 737–740.
23. *Yoshinaga H., Horiuchi R.* Work hardening characteristics of the basal slip of magnesium single crystals // *Trans. JIM*. 1962. V. 3. P. 220–226.
24. *Kesarev A.G., Vlasova A.M.* Modified Sachs's model of deformation of polycrystalline magnesium // *Russian Physics Journal*. 2017. V. 60. № 5. P. 890–899.
25. *Севастьянов В. А.* Курс теории вероятностей и математической статистики. М.: Наука, 1982. 256 с.