

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 539.4

doi: 10.26907/2541-7746.2021.2.197-213

СТРУКТУРА И СООТНОШЕНИЯ МНОГОУРОВНЕВОЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ФОРМИРОВАНИЯ МИКРОТРЕЩИН В ПРОЦЕССЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

К.А. Курмоярцева, Н.В. Котельникова, П.С. Волегов
Пермский национальный исследовательский университет,
г. Пермь, 614990, Россия

Аннотация

В работе построена комплексная физически обоснованная математическая модель для описания поведения металлов в процессе деформирования и разрушения. Рассмотрены основные механизмы деформирования металлов и сплавов. Описан механизм и критерий зарождения микротрещин, а также способ описания зародившихся микротрещин. Представлена структура и основные соотношения разрабатываемой модели с описанием эволюции носителей наиболее значимых механизмов, реализуемых на каждом структурно-масштабном уровне. Описана подмодель эволюции плотностей дислокаций в процессе деформирования за счет таких механизмов, как зарождение новых дислокаций и аннигиляция разноименных дислокаций на близких системах скольжения. Представлен алгоритм реализации модели и результаты моделирования эволюции дислокационной структуры. Установлено, что многоуровневый подход на основе физических теорий пластичности и на введении внутренних переменных является достаточно эффективным для описания как распространения, так и зарождения микротрещин в металлах.

Ключевые слова: математическое моделирование, физические теории пластичности, деформирование поликристаллических материалов, плотности дислокаций, зарождение микротрещин, поврежденность

Введение

Исследования в области разрушения материалов – одна из основных задач, стоящих перед физиками и механиками на протяжении многих десятилетий. Крайне важно обеспечивать надежность используемых повсеместно деталей и конструкций, предотвращая их выход из строя. Основной сложностью в решении этой задачи является огромное многообразие условий нагружения деталей (как в процессах изготовления, так и в эксплуатационных режимах), а также структур и свойств исследуемых металлов и сплавов. При этом известно, что процессы разрушения существенным образом зависят от физических характеристик материала и от условий нагружения, следовательно, существует бесчисленное множество сценариев разрушения. Эти сценарии поддаются некоторой классификации, однако каждый тип разрушения требует детального изучения процесса для каждого конкретного материала как с механической точки зрения, так и с физической. Возникновение и накопление поврежденности необходимо отслеживать на всех стадиях жизни изделий – от изготовления до эксплуатации в различных режимах. На данный момент

существует множество научных работ, посвященных описанию накопления поврежденности и разрушения материалов, среди которых можно выделить подходы, основанные на натуральных экспериментах, на континуальных теориях и на использовании разнообразных математических моделей (включая основанные на методах молекулярной динамики). Однако нельзя утверждать, что существующие исследования позволяют ответить на все теоретические и практические вопросы и решить проблемы повышения надежности деталей. Возникает необходимость единой методологии исследования разрушения, которая позволит описывать все сопутствующие механизмы – от возникновения в материале микронесплошностей до развития магистральных трещин и потери деталью несущей способности. Представляется возможным разработать такую методологию, основываясь на многоуровневых математических моделях, явным образом учитывающих внутреннюю структуру материала и эффективно описывающих процессы деформирования и разрушения деталей.

1. Подходы к описанию неупругого деформирования и разрушения

В начале XX в. считалось, что разрушение наступает довольно резко и сопровождается развитием магистральной трещины, разделяющей тело. В последующие десятилетия было показано, что трещины начинают развиваться задолго до полного разрушения. Представление о микротрещине как об источнике последующего разрушения начало формироваться с известных работ А.А. Гриффитса [1]. В указанной работе рассматривалась неограниченная изотропная упругая пластина, содержащая трещину. Растягивающие равномерные напряжения были направлены перпендикулярно линии трещины. Было показано, что трещина начнет развиваться, если скорость освобождения потенциальной энергии деформирования станет больше прироста поверхностной энергии в теле в результате образования новых поверхностей. Тем самым был сформулирован энергетический критерий распространения трещины.

Однако подход А.А. Гриффитса обладает некоторыми недостатками, в частности, в исходной формулировке он применим только для хрупких тел и не позволяет учитывать потерю энергии на развитие пластической зоны в вершине трещины. Е. Орован [2] и Дж. Ирвин [3] предложили использовать теорию Гриффитса для квазихрупкого разрушения. Учет пластической работы при образовании единицы поверхности позволил перейти от идеальных, хрупких материалов к реальным металлическим материалам.

На практике разрушение твердых тел происходит при напряжениях, на несколько порядков меньших теоретической прочности. Этот факт можно объяснить наличием структурных неоднородностей и дефектов материала на разных масштабных уровнях (вакансии, дислокации, границы зерен, фазы, трещины, поры, включения и т. д.), которые приводят к неравномерному распределению нагрузки по его сечению. Существуют различные подходы, рассматривающие механизмы разрушения и прочности, включая атомистические, термодинамические, феноменологический, экспериментальный и т. д. [4, 5].

Экспериментальные исследования проводятся как с целью обнаружения новых эффектов, формулировки критериев разрушения, так и для описания поведения известных образцов при заданном нагружении [6]. Современное оборудование дает возможность изучать также состояние микроструктуры материала, что позволяет более точно оценить влияние на свойства образца ее изменения в результате неупругого деформирования, включая эффекты заживления дефектов [7]. Экспериментальные работы незаменимы также для идентификации и верификации

математических моделей, разрабатываемых для описания накопления поврежденности и разрушения металлов [8–10]. Однако ввиду существенных различий между лабораторными и реальными условиями эксплуатации деталей использование исключительно экспериментальных данных для решения актуальных задач невозможно [11].

Для исследования микроструктуры материала в объеме образца, изучения распространения микротрещин на протяжении различных стадий деформирования детали при разнообразных условиях нагружения широко применяются математические модели. Их использование позволяет сократить затраты на натурные эксперименты, а также получить новые данные, недоступные при экспериментальном подходе. Одним из самых широких классов математических моделей для описания деформирования металлических образцов являются модели, основанные на континуальном подходе. Ключевой особенностью континуальных моделей для исследования разрушения является введение в их соотношения отдельных параметров (внутренних переменных (ВП)), описывающих структуру поврежденности [12, 13]. Как правило, континуальные модели разрушения основываются на введении некоторого критерия увеличения или распространения трещины (например, введение критического угла раскрытия трещины [14], критической величины поля напряжений у вершины трещины [15, 16], направления нагружения относительно плоскости залегания трещины [17]). Подавляющее большинство работ по исследованию развития поврежденности материала основывается на описании подрастания и распространения уже существующих в материале микротрещин, то есть тело считается изначально поврежденным [18]. Такой подход считается эффективным, так как при помощи него можно моделировать процессы деформирования с целью установления предельно допустимых нагрузок, которые не приведут к разрушению детали. Однако отдельно стоящей и не менее важной задачей является описание зарождения несплошностей в материале (микротрещин, пор) и их дальнейшего развития. Переход к такому описанию лежит в рамках новой концепции моделирования разрушения. Представляется возможным создание более универсальных моделей деформирования, подходящих для широкого класса нагружений и иных условий обработки или эксплуатации.

Исследования процесса разрушения позволяют по-новому подходить к выбору конструкционных материалов и проектированию деталей и конструкций. При этом исследуется зарождение трещин и условия, при которых они начинают развиваться. Актуальной задачей в настоящее время является построение функциональных материалов. Данные материалы проектируют и изготавливают таким образом, чтобы их свойства наилучшим образом соответствовали конкретным условиям эксплуатации выбранной конструкции. Перспективным направлением для решения такого класса задач является подход, основанный на введении внутренних переменных, многоуровневого моделирования и применении физических теорий пластичности (ФТП) [19–22]. Согласно данному подходу, термомеханическое состояние описывается не только классическими параметрами напряжений, деформаций и т. д. но и переменными, характеризующими внутреннюю структуру материала на разных структурно-масштабных уровнях. Реализация многоуровневых математических моделей, базирующихся на ФТП, позволяет явным образом описывать многообразные физические механизмы и эффекты на различных масштабных уровнях: от возникновения, движения и взаимодействий дислокаций до разрушения исследуемого образца или конструкции. Введение внутренних переменных, отражающих состояние и эволюцию микроструктуры материала, позволяет решать задачу создания функциональных материалов с учетом подобранных параметров технологического процесса изготовления детали и свойств готовых изделий.

Исходя из возрастающих требований к характеристикам готовых изделий и к результатам вычислительных экспериментов по определению напряженно-деформированного состояния (НДС) и прочностных свойств, появляется необходимость перехода от отдельных моделей и расчетов на НДС, прочность, усталостное разрушение и т. д. к комплексному описанию поведения деформирования и разрушения изделий с явным учетом внутренней структуры материала и ее изменения в процессах изготовления и эксплуатации. При этом возможно формирование требуемого набора физико-механических свойств деталей и конструкций с помощью проведения вычислительных экспериментов на базе многоуровневых физически ориентированных моделей. Отдельным вопросом является исследование влияния процесса изготовления деталей и конструкций на их деформирование и разрушение уже при эксплуатации. В процессе изготовления материал испытывает значительные пластические деформации и влияние температуры, при этом могут возникнуть остаточные напряжения различного рода и дефектная структура. При эксплуатации эти технологические дефекты могут значительно влиять на развитие разрушения. В связи с этим актуальной задачей является разработка многоуровневой, физически обоснованной математической модели для описания всех стадий жизненного цикла изделия, от изготовления до эксплуатации, включая возможное развитие поврежденности и разрушение.

2. Структура математической модели и описание механизмов неупругого деформирования и разрушения

Процессы деформирования и разрушения поликристаллических материалов являются многоуровневыми и многостадийными. Для комплексного исследования таких процессов с учетом эволюции внутренней дефектной структуры материала необходимо разработать физически обоснованную математическую модель. При этом модель должна учитывать и описывать все значимые физические механизмы, упругое и пластическое деформирование отдельных зерен и их повороты, а также зарождение микротрещин с последующим их развитием.

Одним из лидирующих механизмов неупругого деформирования является внутривитеренное скольжение краевых дислокаций – специфичных линейных дефектов в материале. В зависимости от расположения экстраплоскостей можно выделить положительные и отрицательные дислокации. Плоскости залегания и ориентация векторов Бюргерса дислокаций известны для каждого типа кристаллических решеток. Дислокации в кристаллических материалах образуются уже в процессе изготовления деталей (кристаллизации из расплавов, интенсивных пластических деформаций). При термомеханической обработке известными механизмами образования дислокаций являются работа источников Франка – Рида и двойное поперечное скольжение [23].

Для активации процесса скольжения краевых дислокаций необходимо приложение касательных напряжений, превосходящих некоторое критическое значение напряжений, которое определяется химическим составом материала, накопленными дефектами различной природы. Дислокации, вне зависимости от знака, могут быть заторможены барьерами, границами зерен, включениями и т. д. Данный эффект можно учесть в описании повышения критических касательных напряжений, необходимых для начала скольжения дислокаций.

Неоднородность пластической деформации создает концентраторы напряжений, что может инициировать разрушение. При этом в пластических материалах по сравнению с хрупкими меньше скорость распространения трещин за счет появления пластической зоны в вершине трещины. Двойственное влияние пластического

деформирования проявляется на разных стадиях разрушения, способствуя зарождению микротрещин и тормозя уже существующие [24]. При продолжающейся пластической деформации микротрещины развиваются и переходят в мезотрещины. Для учета многоуровневости процесса разрушения, в течение которого меняются размеры трещин, их форма и механизмы развития, нами была разработана прямая дислокационно-ориентированная математическая модель для описания поведения поликристаллических материалов. Прямые модели являются одноуровневыми [22], однако при этом применяется разделение на структурно-масштабные уровни с позиций реализации различных физических механизмов деформирования и разрушения материала.

Разрабатываемая модель может быть использована для моделирования макроскопического представительного объема материала. Для всей исследуемой области ставится и решается краевая задача упруговязкопластичности, в рамках которой формулируются уравнения равновесия в скоростях, граничные и начальные условия [25]. Для описания неоднородности пластической деформации и разрушения в рамках зерна каждое из совокупности зерен разделено на кристаллиты (субзерна, фрагменты). Элементом моделирования является кристаллит. При этом есть возможность вычислять и анализировать средние напряжения, деформации и распределение плотности дефектов и скоростей их движения для всего поликристаллического агрегата. Это позволяет сравнивать результаты, получаемые с помощью построенной физически ориентированной математической модели, с данными, предоставляемыми моделями на основе макрофеноменологических теорий и экспериментов.

В структуре модели выделяется мезоуровень-I для описания упругого и пластического деформирования кристаллитов (зерен, субзерен, фрагментов) и их поворотов. Переменными данного уровня являются континуальные механические характеристики: напряжения, деформации и скорости их изменения. К явным ВП этого уровня можно отнести тензор упругих свойств, тензор спина, скорость неупругих деформаций, к неявным относятся скорости сдвигов по системам скольжения (СС), ортогональный тензор, определяющий ориентацию решеток кристаллитов. В рамках данного уровня кристаллит рассматривается как материальная точка с однородными напряжениями и деформациями.

Мезоуровень-II вводится для описания эволюции плотностей дислокаций. Переменными в элементах этого уровня являются скалярные плотности дислокаций на СС и скорости их движения. Формулируются эволюционные уравнения для исследования изменения плотности дислокаций за счет таких механизмов, как зарождение новых дислокаций, аннигиляция разноименных дислокаций и образование барьеров. К явным ВП данного уровня можно отнести скорости и плотности дислокаций, критические и касательные напряжения на СС. В неявные ВП входят скорости изменения плотности дислокаций за счет зарождения новых и аннигиляции существующих, плотности барьеров. В рамках данного уровня кристаллит рассматривается как некий объем материала с известными плотностями дислокаций и скоростями их движения. При этом принимается равномерное распределение плотностей дислокаций на СС. Таким образом, эволюция плотностей дислокаций рассматривается на более низком структурном уровне, а вносимый ими вклад в пластическую деформацию определяется суммированием сдвигов, определяемых из уравнения Орована, по всем системам скольжения.

Связь между уровнями осуществляется с помощью замыкающих уравнений, связывающих явные и неявные внутренние переменные, параметры воздействия и отклика разных уровней. С мезоуровня-I передаются напряжения, которые используются для вычисления касательных напряжений на мезоуровне-II. Касательные

напряжения при достижении критического значения активируют скорости движения дислокаций. После вычисления эволюции дефектной структуры материала на мезоуровне-II на вышестоящий уровень передаются значения плотностей дислокаций и скоростей их движения. Перечисленные параметры необходимы для вычисления скоростей неупругих деформаций.

На основе данных об эволюции дислокационной структуры и неоднородности пластической деформации возможен переход к описанию процесса разрушения, а именно зарождения микротрещин. Существует несколько известных дислокационных механизмов формирования зародышей трещин, их можно разделить на несколько групп: механизмы, связанные со слиянием экстраплоскостей многих дислокаций; «раскрытие» плоскости скольжения; взаимодействия дислокаций на пересекающихся плоскостях скольжения; механизм, связанный с заторможенным сдвигом, при котором возникновение трещины обусловлено полями упругих напряжений в голове скопления; раскол хрупкой фазы; всевозможные варианты возникновения микротрещины при пересечении полос скольжения, двойников и границ зерен и т. д. [24, 26–27].

В настоящей работе предполагается использовать механизм зарождения микротрещин согласно модели А. Стро [28]. Основная идея состоит в создании высоких локальных напряжений при заторможенном сдвиге при скоплении n одноименных дислокаций. При достаточно высоком внешнем касательном напряжении две дислокации в голове скопления объединяются и оставшиеся дислокации скопления «сваливаются» в микротрещину. На основе этого механизма можно сформулировать критерий зарождения микротрещины, при этом критическую плотность дислокаций связать с параметрами скопления при данном действующем касательном напряжении. Таким образом, при достижении критической плотности совокупность дислокаций скопления переходит в микротрещину.

В разрабатываемой модели предполагается два состояния кристаллита. Если в кристаллите не начался процесс разрушения, то в нем вычисляется эволюция дефектной структуры, напряжения и деформации. При достижении состояния, при котором выполняется критерий зарождения микротрещины, элемент переходит в разрушенное состояние. На поверхности микротрещины напряжения равны нулю, поэтому предполагается, что элемент теряет способность воспринимать внешние нагрузки. Одним из возможных способов описания разрушенного состояния является введение фиктивных сил, которые освобождают элемент с микротрещиной от напряжений и сопротивления воздействиям.

3. Математическая постановка

Рассмотрим подмодель для описания неупругого деформирования отдельного кристаллита. Основным определяющим соотношением мезоуровня-I является модифицированный закон Гука в скоростной релаксационной форме

$$\dot{\sigma} + \sigma \cdot \omega - \omega \cdot \sigma = \pi : (z - z^{in}), \quad (1)$$

где σ – тензор напряжений Коши, $\omega = \dot{o} \cdot o^T$ – спин решетки, o – ортогональный тензор поворота решетки, π – тензор упругих свойств, z – мера скорости деформации, для которой принята гипотеза об аддитивности упругой z^e и неупругой z^{in} составляющих, согласно которой $z = z^e + z^{in}$. Скорость неупругой деформации определяется следующим соотношением:

$$z^{in} = \sum_{k=1}^n \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{d}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)},$$

в котором $\mathbf{b}^{(k)}$, $\mathbf{n}^{(k)}$ – векторы Бюргерса и нормали плоскости скольжения в k -й системе скольжения соответственно, $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига в k -й системе скольжения, для вычисления которой используется модифицированное соотношение Орована

$$\dot{\gamma}^{(k)} = \dot{\gamma}_+^{(k)} + \dot{\gamma}_-^{(k)} = |\mathbf{b}| \left(\rho_+^{(k)} v_+^{(k)} - \rho_-^{(k)} v_-^{(k)} \right), \quad (2)$$

где $\rho^{(k)}$, $v^{(k)}$ – значения плотностей и средних скоростей дислокаций, передаваемые с мезоуровня-II. В соответствии с соотношением Орована сдвиги на системе скольжения имеют место только при ненулевых скоростях положительных или отрицательных дислокаций.

Таким образом, система соотношений для мезоуровня-I имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} &= \boldsymbol{\pi} : (\mathbf{z} - \mathbf{z}^{in}), \\ \mathbf{z} &= \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^{in}, \\ \boldsymbol{\omega} &= \dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{\sigma}^T, \\ \dot{\gamma}^{(k)} &= |\mathbf{b}| \left(\rho_+^{(k)} v_+^{(k)} - \rho_-^{(k)} v_-^{(k)} \right), \\ \mathbf{z}^{in} &= \sum_{k=1}^n \dot{\gamma}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}. \end{aligned}$$

Значения компонент тензора напряжений $\boldsymbol{\sigma}$ передаются на мезоуровень-II и используются для вычисления касательных напряжений $\tau^{(k)}$ на системах скольжения:

$$\tau^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}. \quad (3)$$

Достижение касательными напряжениями некоторого критического значения свидетельствует о начале пластического деформирования за счет движения дислокаций, величина скорости которых определяется следующим соотношением:

$$v_{\pm}^{(k)} = \pm v_0^{(k)} \exp\left(\frac{-Q}{KT}\right) H\left(|\tau^{(k)}| - \tau_{c\pm}^{(k)}\right) \text{sign}\left(\tau^{(k)}\right), \quad (4)$$

где v_0 – параметр, определяемый длиной свободного пробега дислокаций, Q – величина энергии активации, K – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, $\tau_{c\pm}^{(k)}$ – критические напряжения сдвига на соответствующей системе скольжения, $H(\Delta)$ – функция Хэвисайда, $v_{\pm}^{(k)}$ – скорости движения положительных и отрицательных дислокаций k -й системы скольжения.

Принимается условное разделение дислокаций на положительные и отрицательные в соответствии с расположением их экстраплоскости относительно плоскости скольжения. Скорости таких дислокаций, как и их плотность, могут различаться для одной системы скольжения. Выражение для общей плотности дислокаций k -й системы скольжения имеет вид

$$\rho^{(k)} = \rho_+^{(k)} + \rho_-^{(k)}.$$

Плотности дислокаций и средняя скорость их движения передаются на мезоуровень-I, замыкая общую систему соотношений.

Общая плотность дислокаций существенным образом изменяется в ходе неупругого деформирования; принимается гипотеза об аддитивности механизмов, влияющих на скорость ее изменения:

$$\dot{\rho}_{\pm}^{(k)} = \dot{\rho}_{\text{nuc}}^{(k)} - \dot{\rho}_{\text{ann}}^{(k)} - \dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)},$$

где $\dot{\rho}_{\text{nuc}}^{(k)}$, $\dot{\rho}_{\text{ann}}^{(k)}$, $\dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)}$ – скорости изменения плотности дислокаций за счет зарождения новых дислокаций, аннигиляции и образования дислокационных барьеров соответственно.

Новые дислокации на системе скольжения появляются за счет источников Франка–Рида, активация которых зависит от величины приложенного напряжения. Данный механизм описывается соотношением $\dot{\rho}_{\text{nuc}}^{(k)} = k_{\text{nuc}} \rho_{\text{src}}^{(k)} H(\tau^{(k)} - \tau_{\text{src}}^{(k)})$, где k_{nuc} – параметр модели, $\rho_{\text{src}}^{(k)}$ – плотность источников Франка–Рида на k -й системе скольжения, $\tau_{\text{src}}^{(k)}$ – критическое напряжение активации источника.

Под аннигиляцией дислокаций понимается взаимоуничтожение разноименных дислокаций, движущихся по одной системе скольжения навстречу друг другу. Данный механизм ограничивает рост плотности дислокаций, прямо пропорционально зависит от разности средних скоростей дислокаций и записывается соотношением $\dot{\rho}_{\text{ann}}^{(k)} = h_{\text{ann}} \rho_+^{(k)} \rho_-^{(k)} |v_+^{(k)} - v_-^{(k)}|$, где h_{ann} – характерный масштаб аннигиляции дислокаций.

Дислокации разных систем скольжения при взаимодействии могут образовывать дислокационные барьеры, тип которых зависит от рассматриваемого металла (типа его кристаллической решетки, энергии, дефекта упаковки). Такие барьеры становятся существенным препятствием на пути движущихся дислокаций, с одной стороны, влияют на упрочнение металла, а с другой – провоцируют появление дислокационных скоплений. Изменение плотности дислокаций за счет дислокационных реакций образования барьеров описывается соотношением

$$\dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)} = k_{\text{bar}} \sum_{l=1;N/2}^{N/2;N} R_{\text{bar}}^{(kl)} \rho^{(k)} \rho^{(l)} v^{(k)},$$

где N – число систем скольжения, а k_{bar} – параметр модели. Матрица R_{bar} определяет системы скольжения дислокаций, способные реагировать с образованием дислокационного барьера того или иного типа. Ее компоненты вычисляются по типу кристаллической решетки и взаимному расположению различных систем скольжения [23].

Вклад дислокационных барьеров в упрочнение описывается соотношением

$$\dot{\tau}_{\text{bar}\pm}^{(k)} = \sum_{j=1}^n \frac{B^{(kj)}}{\sqrt{\rho_{\text{bar}}^{(j)}}} \dot{\rho}_{\text{bar}}^{(j)},$$

где B – матрица коэффициентов, описывающих влияние полей напряжений барьеров соседних j -х СС на движущиеся дислокации k -й СС соответственно. Аналогичным образом описывается упрочнение за счет полей напряжений дислокаций, расположенных в соседних системах скольжения:

$$\dot{\tau}_{\text{disl}\pm}^{(k)} = \sum_{j=1}^n \frac{M^{(kj)}}{\sqrt{\rho^{(j)}}} \dot{\rho}^{(j)},$$

где M – матрица коэффициентов, описывающих взаимное влияние полей напряжений дислокаций, принадлежащих разным системам скольжения. Принимая гипотезу об аддитивности вкладов в упрочнение различных механизмов, соотношение для критических напряжений можно записать в виде

$$\dot{\tau}_{c\pm}^{(k)} = \dot{\tau}_{\text{disl}\pm}^{(k)} + \dot{\tau}_{\text{bar}\pm}^{(k)}. \quad (5)$$

Таким образом, формулировка подмодели мезоуровня-II представляется следующей системой соотношений:

$$\begin{aligned}
\tau^{(k)} &= \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)} : \boldsymbol{\sigma}, \\
v_{\pm}^{(k)} &= \pm v_0^{(k)} \exp\left(\frac{-Q}{KT}\right) H\left(|\tau^{(k)}| - \tau_{c\pm}^{(k)}\right) \text{sign}(\tau^{(k)}), \\
\dot{\rho}_{\pm}^{(k)} &= \dot{\rho}_{\text{nuc}}^{(k)} - \dot{\rho}_{\text{ann}}^{(k)} - \dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)}, \\
\dot{\rho}_{\text{nuc}}^{(k)} &= k_{\text{nuc}} \rho_{\text{src}}^{(k)} H\left(\tau^{(k)} - \tau_{\text{src}}^{(k)}\right), \\
\dot{\rho}_{\text{ann}}^{(k)} &= h_{\text{ann}} \rho_+^{(k)} \rho_-^{(k)} |v_+^{(k)} - v_-^{(k)}|, \\
\dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)} &= k_{\text{bar}} \sum_{l=1;N/2}^{N/2;N} R_{\text{bar}}^{(kl)} \rho^{(k)} \rho^{(l)} v^{(k)}, \\
\dot{\tau}_{\text{bar}\pm}^{(k)} &= \sum_{j=1}^n \frac{B^{(kj)}}{\sqrt{\rho_{\text{bar}}^{(j)}}} \dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)}, \\
\dot{\tau}_{\text{disl}\pm}^{(k)} &= \sum_{j=1}^n \frac{M^{(kj)}}{\sqrt{\rho^{(j)}}} \dot{\rho}^{(k)}, \\
\dot{\tau}_{c\pm}^{(k)} &= \dot{\tau}_{\text{disl}\pm}^{(k)} + \dot{\tau}_{\text{bar}\pm}^{(k)}.
\end{aligned}$$

Сформулировано условие образования микротрещины на системе скольжения: если плотность дислокаций одного знака превышает заданную критическую величину ($\rho_{\pm}^{(k)} > \rho_{\text{crit}}$), то считается, что на данной системе скольжения сформирована микротрещина. Принимается гипотеза, согласно которой элемент переходит в разрушенное состояние, если хотя бы на одной из систем скольжения в нем образована микротрещина.

Для описания перехода кристаллита в разрушенное состояние предлагается подход, основанный на введении фиктивных сил. Предполагается, что рассматриваемый кристаллит является частью некоторого поликристаллического агрегата, моделирование поведения которого осуществляется с помощью метода конечных элементов. Принимается гипотеза, согласно которой элемент, находясь даже в разрушенном состоянии, остается в сетке, при этом напряжения в нем должны быть нулевыми. Для корректного описания такого состояния элемента необходимо введение узловых сил, нивелирующих текущие напряжения. Процедуру нахождения значений фиктивных сил необходимо повторять на каждом шаге, так как элемент по-прежнему остается в конечно-элементной сетке, следовательно, НДС в нем может изменяться.

4. Алгоритм численной реализации модели

С математической точки зрения решение полученной системы соотношений сводится к интегрированию системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В силу существенной нелинейности реализация алгоритма осуществляется с помощью пошаговой процедуры. Перед началом расчетов задаются все необходимые материальные функции и константы, равно как начальные значения всех искомых переменных. Используется итерационная процедура, на каждом шаге которой вычисляются значения как всех характеристик НДС, так и дислокационных плотностей.

Отдельно рассматривается первый шаг в процедуре. На мезоуровне-I компоненты тензора напряжений считаются нулевыми. Мера скорости деформации \mathbf{z}

задана в соответствии с типом нагружения. Первый шаг полагается упругим, то есть $z^{\text{in}} = 0, z^e = z$. По закону Гука (1) находятся компоненты скорости тензора напряжений, интегрированием которых вычисляются значения σ ; тензор передается на мезоуровень-II.

На мезоуровне-II заданы начальные значения общей плотности дислокаций по системам скольжения, термодинамические характеристики, плотности источников Франка-Рида и другие параметры модели. Полагаются известными начальные значения критических напряжений на системах скольжения $\tau_{c0}^{(k)}$. С использованием переданного тензора σ вычисляются касательные напряжения (3), по значению которых определяются скорости движения дислокаций (4). По начальным значениям общей плотности дислокаций и заданным или найденным (в общей процедуре – на конец предыдущего временного шага) параметрам вычисляются скорости изменений плотности дислокаций $\dot{\rho}_{\text{dis}}^{(k)}, \dot{\rho}_{\text{ann}}^{(k)}, \dot{\rho}_{\text{bar}}^{(k)}$. Интегрированием последних находится обновленное значение общей плотности дислокаций. Далее уточняются значения скоростей изменения критических напряжений (5), которые также интегрируются для использования в расчете на следующем шаге. Таким образом, на первом шаге пересчитываются и уточняются все величины и характеристики дислокационной структуры элемента. Найденные на мезоуровне-II величины плотности и средней скорости дислокаций передаются обратно на мезоуровень-I и используются на следующем шаге для вычисления скорости сдвига (2).

На последующих шагах алгоритм последовательных вычислений повторяется, однако вместо начальных значений используются характеристики с предыдущего шага.

В конце каждого шага производится проверка на существование микротрещины ($\rho_{\pm}^{(k)} > \rho_{\text{crit}}$), и, если она образована, вычисления в подмодели кристаллита прекращаются, а кристаллит считается разрушенным. Если же решается задача для совокупности кристаллитов, то вычисляются значения фиктивных сил (которые изначально полагаются нулевыми для неразрушенных элементов), нивелирующих напряжения в элементе. Элемент считается разрушенным, однако итерационная процедура для всей системы элементов продолжается до достижения интенсивностью накопленных деформаций предписанного значения.

5. Результаты

Для реализации разработанной подмодели исследования эволюции дислокационной структуры, ее влияния на деформирование и разрушение материала разработана программа для ЭВМ, включающая соотношения для описания неупругого деформирования отдельного кристаллита (мезоуровень-I) и соотношения для эволюции дислокационной структуры (мезоуровень-II). Рассматривалось изменение плотности дислокаций за счет зарождения новых дислокаций и аннигиляции разноименных дислокаций на соседних СС.

Проведены вычислительные эксперименты по упругопластическому деформированию монокристаллического медного образца, в качестве нагружения рассматривался простой сдвиг в плоскости Ox^1x^2 ($z_{12} = z_{21} = 10^{-5}c^{-1}$). Кристаллографическая система координат совпадала с лабораторной. Использованы известные из литературы необходимые для расчетов параметры, такие как тензор упругих свойств, векторы Бюргерса и векторы нормалей для СС.

На рис. 1 представлена зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций. Упрочнение в материале не учитывалось, поэтому можно заметить, что при активации пластического деформирования напряжения практически не изменяются.

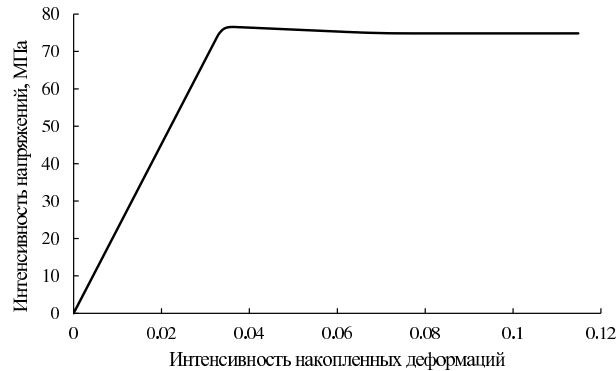


Рис. 1. Зависимость интенсивности напряжений от интенсивности накопленных деформаций

При пластическом деформировании активируются восемь СС (введены обозначения СС: № 1 – $\mathbf{n} = (111)$, $\mathbf{b} = (10-1)$, № 2 – $\mathbf{n} = (111)$, $\mathbf{b} = (0-11)$, № 3 – $\mathbf{n} = (-111)$, $\mathbf{b} = (101)$, № 4 – $\mathbf{n} = (-111)$, $\mathbf{b} = (01-1)$, № 5 – $\mathbf{n} = (1-11)$, $\mathbf{b} = (-101)$, № 6 – $\mathbf{n} = (1-11)$, $\mathbf{b} = (0-1-1)$, № 7 – $\mathbf{n} = (-1-11)$, $\mathbf{b} = (-10-1)$, № 8 – $\mathbf{n} = (-1-11)$, $\mathbf{b} = (011)$). На рис. 2 можно заметить, что при переходе к пластическому деформированию скорость дислокаций по модулю сначала резко возрастает и достигает своих максимальных значений порядка $5 \cdot 10^{-5}$ м/с, а затем постепенно снижается. Дальнейшее падение скоростей дислокаций связано с возрастанием плотностей дислокаций на СС, эволюция которых представлена на рис. 3. Увеличение плотностей дислокаций ведет к большим скоростям сдвигов согласно уравнению (2) и к релаксации напряжений, чем и вызвано уменьшение средней скорости движения дислокаций.

Начальная плотность дислокаций задана со случайным разбросом в диапазоне $1 \cdot 10^8 - 2 \cdot 10^8$ м⁻². Изменение плотностей дислокаций на СС происходит за счет таких механизмов, как зарождение новых дислокаций и аннигиляция. Для вычисления зарождения новых дислокаций предполагалось, что плотность источников пропорциональна плотностям положительных и отрицательных дислокаций и средней скорости движения дислокаций на СС. Условием активации источников считалось достижение соответствующих критических касательных напряжений; значения критических напряжений активации источников выше сдвиговых напряжений, необходимых для начала движения дислокаций.

Увеличение плотности дислокаций ведет к релаксации напряжений, можно также заметить падение величины интенсивности напряжений после достижения интенсивностью накопленных деформаций значения 0.038 (рис. 1), что соответствует активной фазе зарождения новых дислокаций (рис. 3). Следует отметить снижение скорости дислокаций с ростом накопленных пластических деформаций (рис. 2), что вызвано увеличением плотности дислокаций. В процессе деформирования касательные напряжения снижаются и источники зарождения новых дислокаций перестают работать, что приводит к выходу значений плотностей дислокаций на стационарный режим при достижении интенсивности накопленных деформаций значения 0.078 (рис. 3). При выходе значений плотностей дислокаций на данный режим интенсивность напряжений и скорости движения дислокаций меняются незначительно. Полученные результаты свидетельствуют о тесной взаимосвязи процессов деформирования, скольжения дислокаций и эволюции плотностей дислокаций.

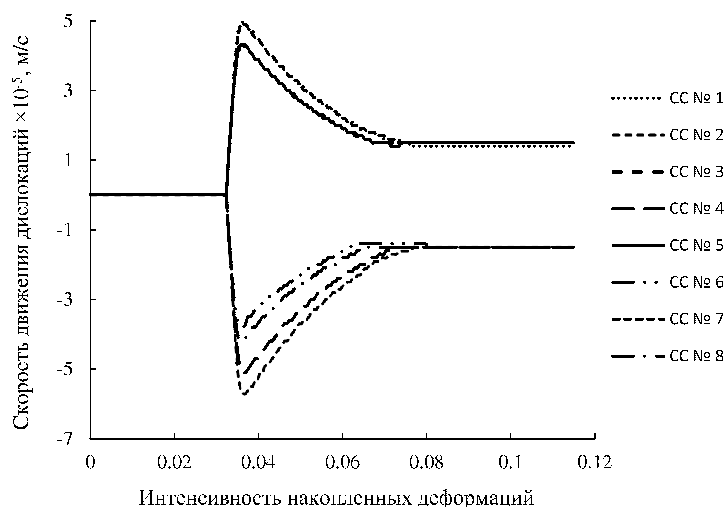


Рис. 2. Зависимость скорости движения дислокаций от интенсивности накопленных деформаций

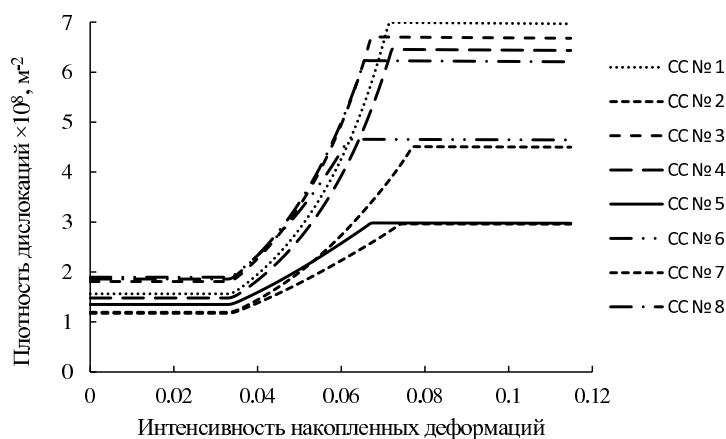


Рис. 3. Зависимость плотностей дислокаций от интенсивности накопленных деформаций

Заключение

Математическое моделирование процессов деформирования и разрушения открывает широкие возможности для конструирования функциональных материалов. В работе рассмотрены некоторые известные подходы к описанию неупругого деформирования и разрушения металлических деталей и конструкций. Приведено описание основных физических механизмов и структуры математической модели, сформулированы соотношения на введенных структурно-масштабных уровнях и связи между ними. Представлены уравнения для описания эволюции дислокационной структуры за счет таких механизмов, как источники Франка–Рида, аннигиляция разноименных дислокаций и образование барьеров. На основе анализа эволюции дислокационной структуры предложен критерий образования микротрещины, обусловленного слиянием скоплений дислокаций. Представлен пошаговый алгоритм реализации модели с выделением первоначального шага. Проведено моделирование деформирования простым сдвигом образца из монокристаллической

меди, представлены результаты анализа эволюции плотностей дислокаций на разных СС и скоростей их движения. Показано взаимовлияние процессов деформирования и эволюции дислокационной структуры. Полученные результаты проведенных вычислительных экспериментов с учетом различных механизмов на нескольких структурно-масштабных уровнях качественно совпадают с известными литературными данными. Кроме того, предложенный подход представляется перспективным для моделирования поведения металлов и сплавов в широком диапазоне термомеханических воздействий.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда в рамках научного проекта № 17-19-01292.

Литература

1. Griffith A.A. The phenomena of rupture and flow in solids // *Philos. Trans. R. Soc., A.* – 1921. – V. 221, No 582–593. – P. 163–198. – doi: 10.1098/rsta.1921.0006.
2. Orowan E. Energy criteria of fracture // *Welding J. Res. Suppl.* – 1955. – V. 34, No 3. – P. 157–160.
3. Irwin G.R. Analysis of stresses and strain near the end of crack traversing a plate // *J. Appl. Mech.* – 1957. – V. 24, No 3. – P. 361–364.
4. Партон В.З., Морозов Е.М. Механика упругопластического разрушения. – М.: Наука, 1985. – 502 с.
5. Пестриков В.М., Морозов Е.М. Механика разрушения. Курс лекций. – СПб.: ЦОП «Профессия», 2012. – 552 с.
6. Taheri S., Vincent L., Le-Roux J.-C. Classification of metallic alloys for fatigue damage accumulation: A conservative model under strain control for 304 stainless steels // *Int. J. Fatigue.* – 2015. – V. 70. – P. 73–84. – doi: 10.1016/j.ijfatigue.2014.07.009.
7. Li L., Flores-Johnson E.A., Shen L., Proust G. Effects of heat treatment and strain rate on the microstructure and mechanical properties of 6061 Al alloy // *Int. J. Damage Mech.* – 2015. – V. 25, No 1. – P. 26–41. – doi: 10.1177/1056789515569088.
8. Cao T.S., Vachey C., Montmitonnet P., Bouchard P.-O. Comparison of reduction ability between multi-stage cold drawing and rolling of stainless steel wire – Experimental and numerical investigations of damage // *J. Mater. Process. Technol.* – 2015. – V. 217. – P. 30–47. – doi: 10.1016/j.jmatprotec.2014.10.020.
9. Brüning M., Gerke S., Schmidt M. Damage and failure at negative stress triaxialities: Experiments, modeling and numerical simulations // *Int. J. Plast.* – 2018. – V. 102. – P. 70–82. – doi: 10.1016/J.IJPLAS.2017.12.003.
10. Tang X.S., Wei T.T. Microscopic inhomogeneity coupled with macroscopic homogeneity: A localized zone of energy density for fatigue crack growth // *Int. J. Fatigue.* – 2015. – V. 70. – P. 270–277. – doi: 10.1016/j.ijfatigue.2014.10.003.
11. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: обзор экспериментальных работ // *Физ. мезомеханика.* – 2015. – Т. 18, № 3. – С. 11–24.
12. Качанов Л.М. Основы механики разрушения. – М.: Наука, 1974. – 312 с.
13. Работнов Ю.Н. Введение в механику разрушения. – М.: Наука, 1987. – 388 с.
14. Walton C.A., Horstemeyer M.F., Martin H.J., Francis D.K. Formulation of a macroscale corrosion damage internal state variable model // *Int. J. Solids Struct.* – 2014. – V. 51. – P. 1235–1245. – doi: 10.1016/j.ijsolstr.2013.12.007.

15. *Martínez-Pañeda E., Betegón C.* Modeling damage and fracture within strain-gradient plasticity // *Int. J. Solids Struct.* – 2015. – V. 59. – P. 208–215. – doi: 10.1016/j.ijsolstr.2015.02.010.
16. *Martínez-Pañeda E., Niordson C.* On fracture in finite strain gradient plasticity // *Int. J. Plast.* – 2016. – V. 80. – P. 154–167. – doi: 10.1016/j.ijplas.2015.09.009.
17. *Aslan O., Forest S.* Crack growth modelling in single crystals based on higher order continua // *Comput. Materials Sci.* – 2009. – V. 45. – P. 756–761. – doi: 10.1016/j.commatsci.2008.09.016.
18. *Lemaitre J.* A continuous damage mechanics model for ductile fracture // *J. Eng. Mater. Technol.* – 1985. – V. 77. – P. 335–344. – doi: 10.1115/1.3225775.
19. *Horstemeyer M.F., Bammann D.J.* Historical review of internal state variable theory for inelasticity // *Int. J. Plast.* – 2010. – V. 26, No 9. – P. 1310–1334. – doi: 10.1016/j.ijplas.2010.06.005.
20. *Maugin G.A.* The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013) // *Mech. Res. Commun.* – 2015. – V. 69. – P. 79–86. – doi: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00.
21. *Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В.* Поврежденность и разрушение: модели, основанные на физических теориях пластичности // *Физ. мезомеханика.* – 2015. – Т. 18, № 6. – С. 12–23.
22. *Трусов П.В., Швейкин А.И.* Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2019. – 605 с. – doi: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV.
23. *Хирт Д.П., Лоте И.* Теория дислокаций. – М.: Атомиздат, 1972. – 600 с.
24. *Владимиров В.И.* Физическая природа разрушения металлов. – М.: Металлургия, 1984. – 280 с.
25. *Поздеев А.А., Трусов П.В., Няшин Ю.И.* Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
26. *Иванова В.С., Гордиенко Л.К., Геминюв В.Н.* Роль дислокаций в упрочнении и разрушении металлов. – М.: Наука, 1965. – 180 с.
27. *Финкель В.М.* Физика разрушения. – М.: Металлургия, 1970. – 375 с.
28. *Stroh A.N.* The formation of cracks as a result of plastic flow // *Proc. R. Soc. London, Ser. A.* – 1954. – V. 223. – P. 404–414. – doi: 10.1098/rspa.1954.0124.

Поступила в редакцию
30.11.2020

Курмоярцева Ксения Александровна, аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов

Пермский национальный исследовательский университет
Комсомольский пр-т, д. 29, г. Пермь, 614990, Россия
E-mail: kurmoiartseva.k@mail.ru

Котельникова Наталья Васильевна, аспирант кафедры математического моделирования систем и процессов

Пермский национальный исследовательский университет
Комсомольский пр-т, д. 29, г. Пермь, 614990, Россия
E-mail: kotelnickova@gmail.com

Волегов Павел Сергеевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования систем и процессов

Пермский национальный исследовательский университет

Комсомольский пр-т, д. 29, г. Пермь, 614990, Россия

E-mail: *crocinc@mail.ru*

ISSN 2541-7746 (Print)

ISSN 2500-2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2021, vol. 163, no. 2, pp. 197–213

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2021.2.197-213

Structure and Relations of a Multi-Level Mathematical Model for Describing Microcracks Formation during Polycrystals Deformation

*K.A. Kurmoiartseva**, *N.V. Kotelnikova***, *P.S. Volegov****

Perm National Research Polytechnic University, Perm, 614990 Russia

E-mail: **kurmoiartseva.k@mail.ru*, ***kotelnikova@gmail.com*, ****crocinc@mail.ru*

Received November 30, 2020

Abstract

The mechanical behavior of parts is significantly affected by the material's internal defective structure and its evolution. The paper aims to build a complex physically based mathematical model for describing the behavior of metals in the deformation and destruction process. The main deformation mechanisms of metals and alloys are considered. The mechanism and criterion for the microcrack nucleation, as well as a method for microcracks describing, are outlined. The structure and main relations of the developed model are presented, including a description of the most significant mechanisms carriers evolution implemented at each structural-scale level. A submodel of the evolution of dislocation densities during deformation due to such mechanisms as the new dislocations generation and opposite dislocations annihilation on close slipping systems is described. The algorithm for implementing the model and the results of modeling the dislocation structure evolution are presented. The multi-level approach based on the crystal plasticity and the introduction of internal variables is found to be sufficiently effective for describing both the propagation and nucleation of microcracks in metals.

Keywords: mathematical modeling, physical plasticity theories, crystal plasticity, deformation of polycrystalline materials, dislocation densities, microcrack nucleation, damage

Acknowledgments. The study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 17-19-01292).

Figure Captions

Fig. 1. Dependence of the stresses intensity on the intensity of accumulated deformations.

Fig. 2. Dependence of the dislocations velocity on the intensity of accumulated deformations.

Fig. 3. Dependence of the dislocations densities on the intensities of accumulated deformations.

References

1. Griffith A.A. The phenomena of rupture and flow in solids. *Philos. Trans. R. Soc., A*, 1921, vol. 221, nos. 582–593, pp. 163–198. doi: 10.1098/rsta.1921.0006.
2. Orowan E. Energy criteria of fracture. *Weld. J. Res. Suppl.*, 1955, vol. 34, no. 3, pp. 157–160.
3. Irwin G.R. Analysis of stresses and strain near the end of crack traversing a plate. *J. Appl. Mech.*, 1957, vol. 24, no. 3, pp. 361–364.
4. Parton V.Z., Morozov E.M. *Mekhanika uprugoplasticheskogo razrusheniya* [Mechanics of Elastoplastic Fracture]. Moscow, Nauka, 1985. 502 p. (In Russian)
5. Pestrikov V.M., Morozov E.M. *Mekhanika razrusheniya. Kurs lektsii* [Fracture Mechanics. A Course of Lectures]. St. Petersburg, TsOP “Professiya”, 2012. 552 p. (In Russian)
6. Taheri S., Vincent L., Le-Roux J-C. Classification of metallic alloys for fatigue damage accumulation: A conservative model under strain control for 304 stainless steels. *Int. J. Fatigue*, 2015, vol. 70, pp. 73–84. doi: 10.1016/j.ijfatigue.2014.07.009.
7. Li L., Flores-Johnson E.A., Shen L., Proust G. Effects of heat treatment and strain rate on the microstructure and mechanical properties of 6061 Al alloy. *Int. J. Damage Mech.*, 2015, vol. 25, no. 1, pp. 26–41. doi: 10.1177/1056789515569088.
8. Cao T.S., Vachey C., Montmitonnet P., Bouchard P.-O. Comparison of reduction ability between multi-stage cold drawing and rolling of stainless steel wire – Experimental and numerical investigations of damage. *J. Mater. Process. Technol.*, 2015, vol. 217, pp. 30–47. doi: 10.1016/j.jmatprotec.2014.10.020.
9. Brüning M., Gerke S., Schmidt M. Damage and failure at negative stress triaxialities: Experiments, modeling and numerical simulations. *Int. J. Plast.*, 2018, vol. 102, pp. 70–82. doi: 10.1016/J.IJPLAS.2017.12.003.
10. Tang X.S., Wei T.T. Microscopic inhomogeneity coupled with macroscopic homogeneity: A localized zone of energy density for fatigue crack growth. *Int. J. Fatigue*, 2015, vol. 70, pp. 270–277. doi: 10.1016/j.ijfatigue.2014.10.003.
11. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and fracture: Review of experimental studies. *Phys. Mesomech.*, 2016, vol. 19, no. 3, pp. 319–331. doi: 10.1134/S1029959916030103.
12. Kachanov L.M. *Osnovy mekhaniki razrusheniya* [Fundamentals of Fracture Mechanics]. Moscow, Nauka, 1974. 312 p. (In Russian)
13. Rabotnov Yu.N. *Vvedenie v mekhaniku razrusheniya* [Introduction to Fracture Mechanics]. Moscow, Nauka, 1987. 388 p. (In Russian)
14. Walton C.A., Horstemeyer M.F., Martin H.J., Francis D.K. Formulation of a macroscale corrosion damage internal state variable model. *Int. J. Solids Struct.*, 2014, vol. 51, pp. 1235–1245. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2013.12.007.
15. Martínez-Pañeda E., Betegón C. Modeling damage and fracture within strain-gradient plasticity. *Int. J. Solids Struct.*, 2015, vol. 59, pp. 208–215. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2015.02.010.
16. Martínez-Pañeda E., Niordson C. On fracture in finite strain gradient plasticity. *Int. J. Plast.*, 2016, vol. 80, pp. 154–167. doi: 10.1016/j.ijplas.2015.09.009.
17. Aslan O., Forest S. Crack growth modelling in single crystals based on higher order continua. *Comput. Mater. Sci.*, 2009, vol. 45, pp. 756–761. doi: 10.1016/j.commatsci.2008.09.016.

18. Lemaitre J. A continuous damage mechanics model for ductile fracture. *J. Eng. Mater. Technol.*, 1985, vol. 77, pp. 335–344. doi: 10.1115/1.3225775.
19. Horstemeyer M.F., Bammann D.J. Historical review of internal state variable theory for inelasticity. *Int. J. Plast.*, 2010, vol. 26, pp. 1310–1334. doi: 10.1016/j.ijplas.2010.06.005.
20. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013). *Mech. Res. Commun.*, 2015, vol. 69, pp. 79–86. doi: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00.
21. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. Damage and fracture: Crystal plasticity models. *Phys. Mesomech.*, 2017, vol. 20, no. 2, pp. 174–184. doi: 10.1134/S1029959917020072.
22. Trusov P.V., Shveikin A.I. *Mnogourovnevye modeli mono- i polikristallicheskih materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya* [Multilevel Models of Mono- and Polycrystalline Materials: Theory, Algorithms, Examples of Application]. Novosibirsk, Izd. Sib. Otd. Ross. Akad. Nauk, 2019. 605 p. doi: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV. (In Russian)
23. Hirth J.P., Lothe J. *Teoriya dislokatsii* [Theory of Dislocations]. Moscow, Atomizdat, 1972. 600 p. (In Russian)
24. Vladimirov V.I. *Fizicheskaya priroda razrusheniya materialov* [The Physical Nature of Metals Fracture]. Moscow, Metallurgiya, 1984. 280 p. (In Russian)
25. Pozdeev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I. *Bol'shie uprugoplasticheskie deformatsii: teoriya, algoritmy, prilozheniya* [Large Elastoplastic Deformations: Theory, Algorithms, Applications]. Moscow, Nauka, 1986. 232 p. (In Russian)
26. Ivanova V.S., Gordienko L.K., Geminov V.N. *Rol' dislokatsii v uprochnenii i razrushenii metallov* [The Role of Dislocations in the Hardening and Fracture of Metals]. Moscow, Nauka, 1965. 180 p. (In Russian)
27. Finkel' V.M. *Fizika razrusheniya* [Physics of Fracture]. Moscow, Metallurgiya, 1970. 375 p. (In Russian)
28. Stroh A.N. The formation of cracks as a result of plastic flow. *Proc. R. Soc. London, Ser. A.*, 1954, vol. 223, pp. 404–414. doi: 10.1098/rspa.1954.0124.

Для цитирования: Курмоярцева К.А., Котельникова Н.В., Волегов П.С. Структура и соотношения многоуровневой математической модели для описания формирования микротрещин в процессе деформирования поликристаллов // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2021. – Т. 163, кн. 2. – С. 197–213. – doi: 10.26907/2541-7746.2021.2.197-213.

For citation: Kurmoiartseva K.A., Kotelnikova N.V., Volegov P.S. Structure and relations of a multi-level mathematical model for describing microcracks formation during polycrystals deformation. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2021, vol. 163, no. 2, pp. 197–213. doi: 10.26907/2541-7746.2021.2.197-213. (In Russian)