

УДК 539.214;539.374

© 1993 г. Е. А. ЛЕОНТЬЕВ, В. Р. ФИДЕЛЬМАН

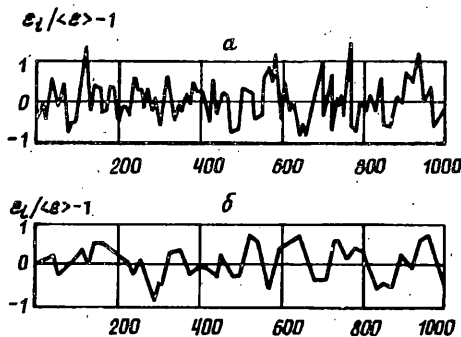
ПРИНЦИП МАКСИМУМА ЭНТРОПИИ И ЗАДАЧА ОПИСАНИЯ ПОЛЯ МИКРОДЕФОРМАЦИИ В ПЛАСТИЧЕСКИ ДЕФОРМИРУЕМЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛАХ

В работе на основе анализа экспериментальных данных теоретически исследуется микронееднородное пространственное распределение пластических деформаций в активно нагружаемых поликристаллических металлах. Предложен формализм статистического описания этих распределений, основанный на принципе максимума информационной энтропии и позволяющий учесть особенности внутреннего строения поликристаллов и эволюцию их структуры. С помощью предложенного формализма построена модель, описывающая изменение статистических характеристик структуры и поля микродеформаций в процессе активного нагружения однофазных поликристаллических металлов. Результаты расчета сопоставляются с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

1. Экспериментальные исследования микроособенностей распределения пластической деформации. Неоднородность протекания пластической деформации (ПД) по микрообластям изучалась в работах [1—4]. Исследовались однофазные и двухфазные поликристаллические металлы, имеющие различное кристаллическое строение (объемноцентрированную и гранецентрированную кубические решетки, гексагональную плотноупакованную решетку), отличающиеся исходным состоянием микроструктуры и средним размером зерна. Перед испытанием отожженные образцы цилиндрической формы подвергались механической полировке и электрополированию так, чтобы вся рабочая поверхность образца представляла собой микрошлиф. Затем на поверхность образца вдоль его оси наносились реперные точки (уколы алмазной иглы) с наименьшей базой 10 мкм. Минимальный интервал, на котором исследовалась пластическая неоднородность, выбирался в 3—4 раза меньше среднего размера зерна. Общее число реперных точек на одном образце менялось от 200 до 1000. Образцы испытывали в условиях простого и сложного нагружения. Вся деформация образца разбивалась на три потяга. После каждого потяга измерялись расстояния между реперными точками и строились кривые распределения микродеформаций вдоль реперной линии.

Типичные результаты измерений, полученные в работе [1] для активного одноосного растяжения образцов из алюминиевого сплава и армко-железа, представлены на фиг. 1, а и 1, б; символом ϵ , на фигуре обозначена деформация i -го участка, символом $\langle \epsilon \rangle$ — средняя деформация образца, общая длина отрезка реперной линии составляет 1000 мкм. Проведенные исследования показали, что поликристаллические металлы и сплавы характеризуются высоким уровнем неоднородности напряженно-деформированного состояния в микрообъемах независимо от их кристаллического строения, состояния микроструктуры и условий нагружения. Измеренные распределения микродеформаций являются индивидуальной характеристикой испытываемого материала и состояния его внутренней структуры.

Отличительной особенностью простого нагружения, которая наблюдается у всех исследованных в [1—4] поликристаллов, является повторяемость микроочагов повышенной и пониженной ПД на разных ступенях нагружения. Первоначальное



Фиг. 1

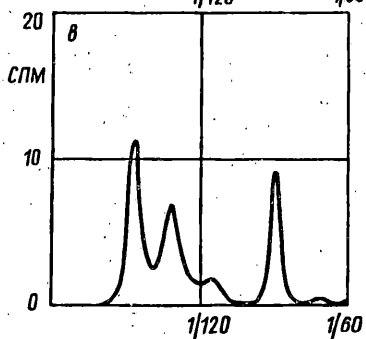
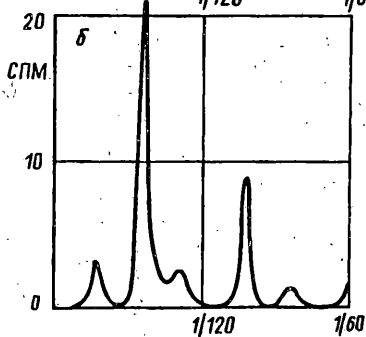
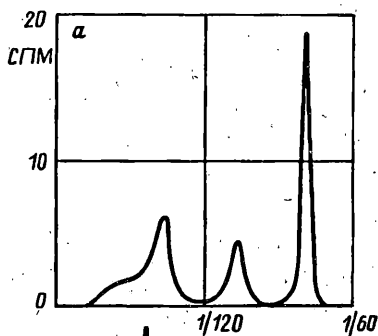
распределение локальных скоростей деформации сохраняется с высокой степенью точности в ходе всего процесса активного нагружения, так что с ростом средней деформации неоднородность ее распределения быстро увеличивается. Такой результат объясняется тем, что локальное упрочнение в условиях активного нагружения не оказывает существенного влияния на развитие микронеоднородной ПД.

Были рассчитаны автокорреляционные функции распределений микродеформаций [2—3]. В большинстве случаев автокорреляционные функции имеют осциллирующий характер и медленно затухают с увеличением интервала корреляции, что свидетельствует о сильной взаимосвязи различных микрообластей пластически деформируемых поликристаллов.

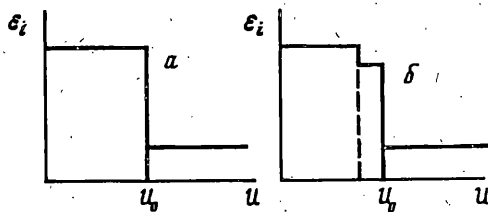
Важной характеристикой сложных систем с изменяющейся структурой является спектральная плотность мощности внутренних стохастических полей и процессов [5]. Спектральная плотность мощности (СПМ) является макрохарактеристикой системы, позволяющей судить о степени самоорганизации (или хаотизации) процессов, происходящих в ней. СПМ поля микродеформаций содержит информацию о пространственном масштабе и относительном весе процессов, осуществляющих пластическую деформацию, что делает спектральный анализ этого поля удобным инструментом для исследования эволюции структуры материала в ходе ПД.

Для расчета СПМ поля микродеформаций воспользуемся экспериментальными данными о распределении ϵ , вдоль оси цилиндрического образца, полученными в работе [1]. Эти данные относятся к случаю одноосного активного растяжения образца, изготовленного из армо-железа. Кривые распределения микродеформаций измерялись при трех последовательно возрастающих значениях $\langle \epsilon \rangle$, лежащих в пределах 3—12%. Результаты проведенного численного расчета эволюции СПМ с увеличением средней деформации приведены на фиг. 2; числовые значения частоты на оси абсцисс отложены в единицах мкм^{-1} . Как видно из графиков, экспериментальный спектр уже на начальной стадии ПД (фиг. 2, а) имеет несколько ярко выраженных пиков интенсивности. Это указывает на существование в поликристалле даже при небольших значениях $\langle \epsilon \rangle$ ряда выделенных размеров, на которых поведение микрообъемов сильно коррелировано. Один из таких размеров, соответствующий на фиг. 2, а максимальному пику интенсивности, приблизительно равен среднему размеру зерна поликристалла до деформации. С увеличением $\langle \epsilon \rangle$ в СПМ появляются пики большой амплитуды в области низких частот, а высокочастотные составляющие спектра заметно понижаются (фиг. 2, б — в). Такое поведение СПМ означает возникновение в материале структурных образований, объединяющих десятки и сотни кристаллитов, и служит экспериментальным подтверждением современных представлений о кооперативном поведении ансамбля зерен поликристалла в условиях развитой ПД [6, 7].

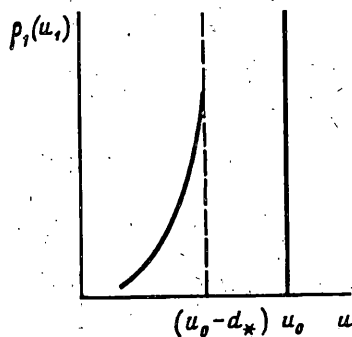
2. Некоторые общие замечания. Проблема описания механических свойств



Фиг. 2



Фиг. 3



Фиг. 4

микронеоднородных материалов с эволюционирующей в процессе деформации структурой тесно связана с изучением реальных механизмов возникновения остаточных деформаций и возможностью их учета при обработке имеющейся информации. Успех в решении этой проблемы во многом зависит от состояния теории микронеоднородной ПД сложных сред с изменяющейся структурой. В настоящей работе предпринята попытка описать особенности пространственного распределения поля остаточных микродеформаций в пластически деформируемых поликристаллических металлах на основе принципа максимума информационной энтропии.

Отметим, что получить решение этой задачи не удастся в рамках традиционного механического или физического подхода. Механика деформируемого твердого тела оперирует с тензорами, компоненты которых являются средними по объемам, содержащим большое число разориентированных кристаллитов. Получаемые при таком подходе «гладкие» распределения деформаций и напряжений обладают очевидными преимуществами при анализе механических свойств элементов конструкций и других макротел, однако, совершенно не отражают реальный уровень неоднородности протекания ПД в микрообъемах и связанные с этим структурно-эволюционные эффекты.

Закономерности процесса деформирования микрообъемов традиционно исследуются в рамках физического подхода, основанного на анализе динамических свойств дислокаций и других дефектов кристаллической решетки [7]. Физический способ описания успешно используется при моделировании структурно-пластического поведения монокристаллов или небольшого числа смежных зерен поликристалла. Для описания этим способом пространственного распределения микрордеформаций необходимо точно проанализировать кинетику огромного числа содержащихся в макрообъемах дефектов кристаллической решетки, что сделать практически невозможно. Последнее не обязательно связано с неумением решать большие системы нелинейных дифференциальных уравнений, а может являться отражением сложного поведения нелинейных сред, похожего на стохастическое [8, 9].

Другая существенная особенность решаемой задачи заключается в том, что информация о состоянии микроструктуры поликристалла, которая необходима для отыскания точного решения, всегда заведомо неполная. Действительно, если рассматривать реальную ситуацию, то в распоряжении исследователя имеется лишь ограниченный набор макропараметров, характеризующий поликристалл в целом, и несколько установленных в рамках физического подхода микросоотношений, описывающих механические свойства и структурные изменения единичных кристаллитов или их небольшой группы. Поэтому решать поставленную задачу приходится на основе частичной информации об исследуемом поликристалле, что приводит к необходимости использовать статистические методы описания полей микрордеформаций.

3. Принцип максимума информационной энтропии. Наиболее общим и обоснованным подходом к решению задач с неполными данными является с точки зрения теории информации принцип максимума энтропии (ПМЭ), сформулированный Джейнсом [10—12], который предложил рассматривать его как общий принцип статистического вывода. Энтропия здесь служит мерой информационной неопределенности функции распределения случайной величины. В наиболее общей форме ПМЭ утверждает, что если мы хотим сделать какую-либо оценку на основе неполной информации о системе, необходимо использовать такое распределение вероятностей, которое, согласуясь с имеющейся априорной информацией, имеет максимальную энтропию S [13]:

$$S = - \int \rho(X) \ln \rho(X) d(X) \quad (3.1)$$

где $\rho(X)$ — плотность вероятности величины X , вообще говоря многомерной.

Практическая ценность ПМЭ доказана во многих конкретных приложениях. Все основные результаты статистической механики, как равновесной, так и неравновесной, могут быть получены как следствие этого принципа [10, 11, 14]. Его успешно используют в задачах спектрального оценивания [12, 15] и восстановления изображений [16, 17]. Теоретическое обоснование ПМЭ в наиболее общей форме дано в работах [10, 12].

Прежде чем использовать ПМЭ для решения нашей задачи, покажем, как он работает на простом иллюстративном примере. Рассмотрим систему, которая может находиться в различных состояниях j , каждое из которых однозначно характеризуется непрерывно изменяющейся переменной $z \in \{z_j\}$. В общем случае, мы можем говорить об ансамбле таких систем в том же смысле, что и в статистической механике. Предположим, что само значение z_j недоступно непосредственному измерению. Вместо этого экспериментально определены некоторые статистические средние различных функций от $\{z_j\}$, например, среднее значение $\langle z \rangle$ и дисперсия σ^2 . Необходимо на основе имеющейся информации оценить вероятность того, что система находится в состоянии z_j . С точки зрения математической статистики это означает, что мы должны сделать «непредвзятую» оценку функции плотности вероятности $p(z)$, у которой известны только первые два момента:

$$\langle z \rangle = \int z p(z) d(z) \quad (3.2)$$

$$\sigma_z^2 = \int (z - \langle z \rangle)^2 p(z) d(z) \quad (3.3)$$

Разумеется, на основе только этих данных нельзя сделать однозначного заключения относительно $p(z)$. Задача состоит в том, чтобы определить наиболее вероятный закон распределения из всего множества функций $p(z)$, согласующихся с ограничениями (3.2—3.3) и условием нормировки. Джейнсом было показано, что таким законом распределения является функция $p_*(z)$, которая характеризуется максимальной энтропией (3.1) и удовлетворяет имеющейся неполной информации. Используя метод неопределенных множителей Лагранжа, нетрудно показать [10], что

$$p_*(z) = (2\pi)^{-1/2} \sigma_z^{-1} \exp(-(z - \langle z \rangle)^2 / 2\sigma_z^2) \quad (3.4)$$

т. е. z представляет собой нормально распределенную случайную величину. Подчеркнем, что дополнительное требование максимизации энтропии (3.1) принципиально изменило ситуацию и вместо бесконечного числа решений мы пришли к единственному, «максимально правдоподобному» (по отношению к имеющимся неполным данным) закону распределения.

4. Формализм статистического описания тензорных полей. Реальные поликристаллические металлы представляют собой конгломерат кристаллографически разориентированных сплошносопряженных структурных элементов. Морфологически таким элементам соответствуют хорошо известные в физике прочности и пластичности объекты типа зерен, ячеек, фрагментов [6, 7, 18]. В дальнейшем любой объект данного типа будем обозначать термином «зерно», хотя фактически ему может соответствовать также ячейка или фрагмент. Размеры таких структурных элементов много больше характерных размеров кристаллической решетки, но, как правило, малы в сравнении с типичными размерами макрообъемов. В первом приближении можно считать, что деформация внутри зерен распределена пространственно однородно и скачком изменяется при переходе от одного структурного элемента к другому [6].

Основой для использования ПМЭ при решении задачи статистического описания микроособенностей поля деформаций служит взгляд на его пространственное распределение по ансамблю зерен поликристалла как на реализацию некоторого случайного поля. Каждая реализация такого поля однозначно определяет средние значения исследуемой величины ε в N зернах поликристалла или одно значение многомерного вектора $E = \{\varepsilon_i\}$, $i = 1, 2, \dots, N$. Плотность вероятности того, что величина E в единичном «испытании» примет значение $(\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)$, обозначим $\rho(E)$. Считается, что известны средние по ансамблю некоторых функций $f_k(E)$, описывающих поведение поликристалла в целом:

$$\langle f_k(E) \rangle = \int_{\Omega} f_k(E) \rho(E) d(E), \quad k = 1, \dots, L \quad (4.1)$$

где интегрирование ведется по всей области существования $f_k(E)$. На практике эти средние являются измеряемыми на опыте средними значениями компонент тензоров деформации, скорости деформации и значениями корреляционных функций случайных полей. Иными словами, это значения макропеременных, описывающих весь поликристалл. К ограничениям (4.1) необходимо добавить условие нормировки:

$$\int_{\Omega} \rho(E) d(E) = 1 \quad (4.2)$$

Задача отыскания функции $\rho(E)$, имеющей максимальную энтропию (3.1) и согласующейся с условиями (4.1—4.2), часто встречается в статистической физике и может быть решена методом неопределенных множителей Лагранжа. Поскольку

энтропийный функционал с ограничениями (4.1—4.2) является выпуклым [19], находим единственное решение задачи отыскания его условного экстремума

$$\rho_*(E) = \exp \left\{ - \sum_{k=0}^L \lambda_k f_k(E) \right\} \quad (4.3)$$

где λ_k — неопределенные множители Лагранжа, $f_0(E) = 1$, т. е. здесь с помощью λ_0 учтено условие нормировки (4.2). Чтобы установить конкретный вид распределения (4.3), нужно определить значения множителей λ_k . Это делается подстановкой (4.3) в (4.1). Получаем систему из $(L+1)$ нелинейных относительно λ_k уравнений, которую в принципе можно решить каким-либо итерационным методом. В результате находим распределение компонент тензоров по кристаллографически разориентированным микрообъемам, согласующееся с макрохарактеристиками поликристалла.

Известно, что пластическая деформация зерен поликристалла приводит к качественным изменениям их структурного состояния [6, 7, 18]. Предположим, что структурный отклик зерна на его формоизменение описывается набором кристаллогеометрических параметров $Q = \{q_1, q_2, \dots, q_m\}$. Например, это могут быть параметры образованной в процессе деформации внутри зерна малоугловой границы разориентации. Величина Q в i -м элементе ансамбля зависит от локальных значений компонент тензора в теле зерна и на его границе, а также от свойств $\{a_k\}$ рассматриваемого микрообъема

$$Q = Q \{ \varepsilon_i, \{ \varepsilon_j' \}, \{ a_k \} \} \quad (4.4)$$

Символом $\{ \varepsilon_j' \}$ в (4.4) обозначены средние значения компоненты тензора ε в соприкасающихся с рассматриваемым структурным элементом зернах.

Конкретный вид соотношения (4.4) определяется природой исследуемого материала. В некоторых случаях его можно получить из «первых принципов», анализируя поведение дефектов кристаллической решетки в различных условиях нагружения. Однако, чаще всего информация об эволюционных изменениях состояния микроструктуры кристаллита имеет характер качественных оценок. В этом случае структурную релаксацию можно учесть с помощью ввода в процедуру вычисления $\rho_*(E)$ условных вероятностей осуществления соответствующих изменений микроструктуры зерен. Очевидно, что значения условных вероятностей будут определяться локальными величинами макропараметров и скоростью процессов аккомодационной перестройки микроструктуры. Более подробно данный способ учета эволюционных изменений описывается в последней части работы, на конкретном примере использования формализма статистического описания тензорных полей.

Таким образом, для статистического описания поликристалла с эволюционирующей структурой необходимо найти такую плотность вероятности случайной величины E , которая а) имеет максимальную энтропию (3.1); б) согласуется с текущим значением макропараметров, описывающих поликристалл в целом (в простейшем случае это макропараметры, задающие условия нагружения); в) обеспечивает соответствие локальных значений макропараметров набору условных вероятностей различных способов структурного отклика зерен на их деформацию в заданном температурно-силовом режиме нагружения.

Учет условий (в) является нетрадиционным моментом при решении задачи поиска оптимальной в смысле ПМЭ функции плотности вероятности, поскольку данные условия не могут быть записаны в виде интегральных соотношений для всего ансамбля зерен. Однако именно эти условия позволяют ввести информацию о структурном отклике зерен в расчет функции $\rho_*(E)$ и построить формализм описания сложных сред с эволюционирующей структурой.

Подход к решению такой задачи дает то обстоятельство, что принцип мак-

сумма энтропии может быть сформулирован несколько по-иному, а именно следующим образом: в пространстве распределения вероятностей из всего множества функций $\rho(E)$, одинаково хорошо согласующихся с неполной априорной информацией о случайной величине E , следует выбрать ту функцию распределения, которая является максимально «неопределенной». Энтропия (3.1) согласно шенноновскому определению информации [13] является лишь недвусмысленной количественной мерой информационной неопределенности распределения $\rho(E)$. Такая мера, как известно [13], обладает уникальными свойствами и согласуется с нашими интуитивными представлениями о том, что из двух распределений вероятностей, одинаково удовлетворяющих всем другим условиям, более «широкое» распределение имеет большую «неопределенность», чем распределение с острыми пиками.

В силу этих соображений для численного расчета распределения максимальной энтропии $\rho_*(E)$ может быть использована хорошо известная стохастическая процедура Монте-Карло. Каждая реализация случайной величины E моделируется в этом случае на ЭВМ с помощью датчика равномерно распределенной случайной величины. Равномерное распределение имеет максимум энтропии, что обеспечивает максимальную неопределенность разыгрываемых значений E и тем самым выполнение условия (а). Затем из множества реализаций вектора E отбираются те, которые удовлетворяют интегральным характеристикам ансамбля. Интегральный критерий отбора соответствует в нашей задаче проверке на согласованность реализаций случайного поля заданным макропараметрам и обеспечивает выполнение условий (б). По набору отобранных реализаций E_1, E_2, \dots, E_n можно построить гистограмму распределения $\rho_*(E)$ и получить тем самым оценку пространственного распределения макровеличины по зернам, микроструктура которых не претерпевает качественных изменений.

Если такие изменения происходят, то имеющуюся информацию о них необходимо согласовать со значением переменной в каждом зерне, т. е. с величиной каждой компоненты N -мерного вектора E . В этом случае равномерное распределение в процедуре Монте-Карло заменяется набором условных вероятностей, которые учитывают информацию о структурном отклике и имеют максимальную энтропию. Моделирование реализаций случайного вектора E с помощью набора таких функций распределения обеспечивает выполнение условий (а) и (в). Для выполнения (б), как и ранее, отбираются только те реализации, которые соответствуют интегральным характеристикам ансамбля. По вычисленному таким образом набору векторов E_1, E_2', \dots, E_n' делается оценка функции распределения $\rho_*(E)$.

5. Расчет эволюции статистических характеристик структуры пространственного распределения микродеформаций в ходе активного нагружения поликристаллов. Поскольку большая часть экспериментального материала относится к исследованию неоднородности одномерного пространственного распределения деформации, ограничимся анализом одномерного случая. Рассмотрим испытания на одноосное растяжение с постоянной средней скоростью деформации $\langle \dot{\epsilon} \rangle$. Значение локальной скорости деформации $\dot{\epsilon}_i$, относящейся к i -му структурному элементу, в общем случае отличается от измеряемого среднего $\langle \dot{\epsilon} \rangle$ и находится в некотором интервале скоростей деформации $[\dot{\epsilon}_-, \dot{\epsilon}_+]$. Попытаемся первоначально оценить распределение локальных скоростей деформаций $\{\dot{\epsilon}_i\}$ по зернам поликристалла, а затем перейдем к исследованию эволюции пространственного распределения деформаций в процессе активного нагружения.

Пусть известно исходное пространственное распределение зерен. Применительно к одномерной задаче это означает, что известен набор линейных размеров зерен $\{d_i\} = D, i = 1, 2, \dots, N$ в порядке их чередования вдоль оси растяжения. В этом случае необходимо оценить распределение $\{\dot{\epsilon}_i\} = E$ по зернам на основе

знания только средней скорости деформации всего ансамбля элементов, которая связана с $\langle \dot{\epsilon} \rangle$ соотношением

$$\langle \dot{\epsilon} \rangle = 1/D_0 \sum_{i=1}^N \dot{\epsilon}_i d_i = 1/D_0 (\dot{E} \cdot D), \quad D_0 = \sum_{i=1}^N d_i(t_0) \quad (5.1)$$

где D_0 — исходная длина поликристалла вдоль оси растяжения.

В соответствии с предложенным формализмом статистического описания будем рассматривать вектор E как единичную реализацию N -мерного случайного поля, каждая из реализаций которого удовлетворяет имеющейся в нашем распоряжении информации. Ансамбль реализаций такого поля $\{E\}$ состоит из огромного числа «плотнупакованных элементов», что позволяет осуществить переход к непрерывному множеству реализаций случайной величины E и использовать аналитические методы ее описания. Плотность вероятности того, что реализуется значение E , должна удовлетворять согласно (5.1) единственному ограничению

$$\langle \dot{\epsilon} \rangle = 1/D_0 \int (\dot{E} \cdot D) \rho(\dot{E}) d(\dot{E}) \quad (5.2)$$

Интегрирование в (5.2) осуществляется по всему непрерывному множеству реализаций случайного поля. Необходимо найти плотность вероятности $\rho(E)$, которая, удовлетворяя ограничению (5.2), имеет максимальную энтропию S . Если функция распределения $\rho(E)$ известна, то оценка случайной величины E легко вычисляется как ее статистическое среднее

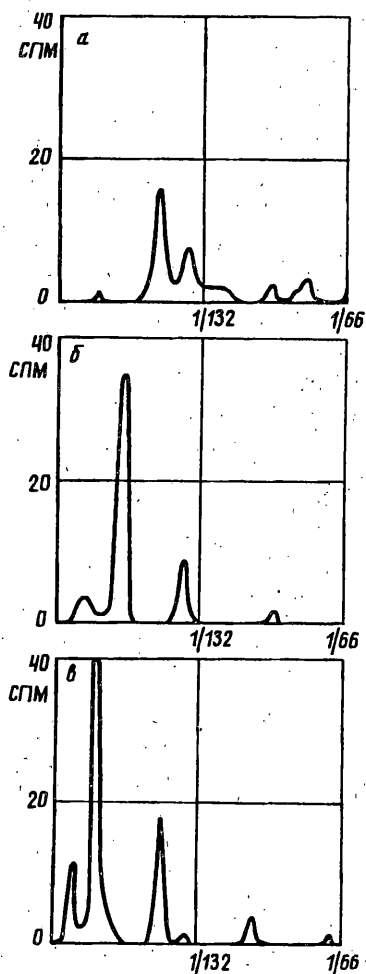
$$\langle E \rangle = \int E \rho(E) d(E) \quad (5.3)$$

Задача отыскания $\langle E \rangle$ решалась методом статистических испытаний на ЭВМ. С помощью датчика равномерно распределенных случайных чисел, лежащих в интервале $[\dot{\epsilon}_-, \dot{\epsilon}_+]$, разыгрывались реализации случайного N -мерного поля локальных скоростей деформации. Затем отбирались те из них, которые удовлетворяют соотношению (5.1) в пределах точности измерения $\langle \dot{\epsilon} \rangle$. Оценка среднего значения вектора E осуществлялась на основе расчета достаточно большого количества реализаций случайного поля.

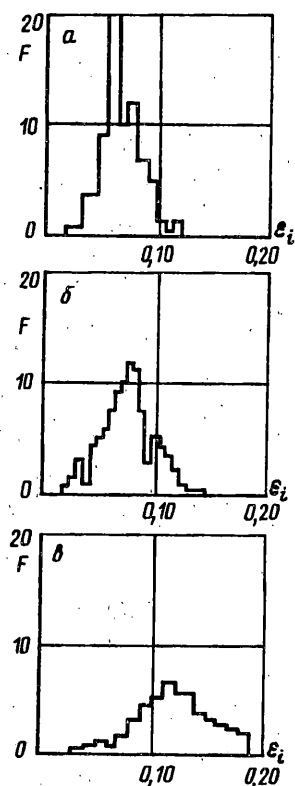
Первоначальное распределение скоростей деформации при активном нагружении сохраняется с высокой степенью точности [1—4]. Применительно к нашей задаче это означает, что локальные скорости деформации зерен остаются постоянными до тех пор, пока их внутренняя микроструктура не меняется качественным образом. В этом случае изменение пространственного распределения деформаций $\{e_i\}$ со временем t вычисляется с помощью N линейных соотношений: $\{e_i\} = \{e_i(t_0) + \dot{\epsilon}_i(t_0)(t - t_0)\}$, где $e_i(t_0)$ — деформация i -го зерна в момент времени t_0 .

Для учета качественных изменений состояния микроструктуры зерен обратимся к результатам физических исследований больших пластических деформаций металлов и сплавов [6]. Эволюция внутренней структуры зерен рассматривается с современной точки зрения как результат конкуренции процесса накопления пластических несовместностей на границах разориентации и процесса их релаксации. Образование пластических несовместностей вызывает появление вблизи границ зерен локально высоких напряжений. Рост таких напряжений активирует протекание, наряду с активной, аккомодационной пластической деформации. Последняя не вносит вклада в изменение средней деформации $\langle \epsilon \rangle$ и представляет собой результат адаптивной перестройки микроструктуры зерен, стремящейся релаксировать возникшие напряжения.

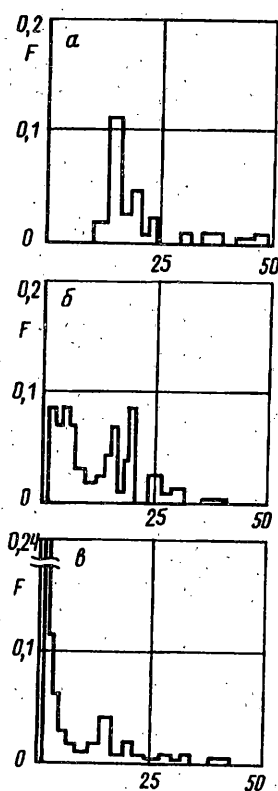
Экспериментальные исследования показали [6], что при больших степенях деформации поликристаллические металлы и сплавы независимо от способа нагружения, типа кристаллической решетки и исходной внутренней структуры превращаются в совокупность разориентированных, сплошносопряженных мик-



Фиг. 5



Фиг. 6



Фиг. 7

рообластей размером от десятых долей микрона до нескольких микрон. При этом площадь границ разориентации, приходящихся на единицу объема, с ростом $\langle \epsilon \rangle$ заметно увеличивается. Эти данные свидетельствуют о том, что основным способом аккомодации пластических несовместностей у высокопластичных металлов и сплавов является процесс образования новых границ разориентации различного типа в теле первоначально однородно ориентированных кристаллитов. При этом «рассасывание» пластической несовместности на существующих границах осуществляется за счет ее перераспределения по вновь образованным границам разориентации. Схематически данный процесс показан на фиг. 3, где изображены графики распределения локальной деформации ϵ_i пары смежных зерен до (фиг. 3, а) и после (фиг. 3, б) релаксации пластической несовместности; символом u обозначена пространственная координата, символом u_0 — координата межзеренной границы.

Для моделирования подобных изменений внутренней структуры зерен каждому типу структурного отклика приписывается условная вероятность его осуществления. Априорная информация, заданная в такой форме, позволяет статистически смоделировать, каким образом и в какой момент времени произойдет релаксация

пластических несовместностей в каждой паре сплошносопряженных зерен. Например, положение новых границ разориентации, образующихся при релаксации пластической несовместности путем фрагментации зерен, считалось случайным и определялось соответствующей плотностью распределения $\rho_1(u_1)$, где u_1 — координата вновь образованной границы разориентации. Из экспериментальных исследований известно, что вновь образующиеся микрообласти не могут иметь размер меньше некоторой критической для данного материала величины d_* , и что сначала фрагментируются микроучастки, расположенные вблизи границ зерен [6]. Качественный вид функции $\rho_1(u_1)$, удовлетворяющей этим требованиям, представлен на фиг. 4.

Результаты расчета эволюции СПМ пространственного распределения деформации с ростом ее среднего значения приведены на фиг. 5; числовые значения частоты указаны в единицах измерения мкм^{-1} ; среднее значение деформации $\langle \epsilon \rangle$ на фиг. 5, а равно 5,7%, на фиг. 5, б — 7,3%, на фиг. 5, в — 13,2%. Расчеты проводились для армко-железа при следующих значениях параметров: $d_* = 1 \text{ мкм}$, $D_0 = 1000 \text{ мкм}$, $\dot{\epsilon}_- = 0 \text{ с}^{-1}$, $\dot{\epsilon}_+ = 0,1 \text{ с}^{-1}$, $\delta(\epsilon) = 0,5\%$, $\langle \epsilon(t_0) \rangle \approx 4\%$. В качестве первоначального распределения $\{\epsilon_i(t_0)\}$ использовались экспериментальные данные, показанные на фиг. 1, б. Как видно из графиков на фиг. 5, результаты расчета эволюции СПМ с ростом $\langle \epsilon \rangle$ качественно хорошо согласуются с экспериментальным поведением СПМ.

На фиг. 6 приведены расчетные гистограммы F распределения локальных деформаций при тех же значениях средней деформации, что и на фиг. 5. Видно, что с ростом $\langle \epsilon \rangle$ неоднородность распределения локальных деформаций заметно увеличивается, что хорошо согласуется с результатами исследований [1—4]. Как и следовало ожидать, значительного увеличения средней величины пластических несовместностей и, соответственно, внутренних напряжений при этом не происходит вследствие самосогласованного поведения ансамбля зерен поликристалла.

Вычисленные гистограммы функции распределения зерен по размерам приведены на фиг. 7; числовые значения линейного размера зерна $\langle d \rangle$ указаны в мкм . В соответствии с экспериментальными данными [6, 18] такие распределения с увеличением средней деформации должны сужаться, а величина среднего размера зерна — уменьшаться. Причем темп измельчения разориентированных кристаллитов неодинаков на разных этапах нагружения. Наиболее интенсивное измельчение происходит на начальном этапе деформирования ($\langle \epsilon \rangle \leq 0,2$). Видно хорошее качественное соответствие поведения рассчитанных гистограмм экспериментальным данным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гурьев А. В., Кукса Л. В., Хесин Ю. Д. Исследование микросособностей деформации реальных сплавов//Известия АН СССР. Металлы. 1967. № 2. С. 122—129.
2. Кукса Л. В. Закономерности развития микронеоднородной пластической деформации металлов//Проблемы прочности. 1979. № 9. С. 13—19.
3. Кукса Л. В., Лебедев А. А., Ковальчук В. И. О законах распределения микродеформаций в двухфазных поликристаллических сплавах при простом и сложном нагружении//Проблемы прочности. 1986. № 1. С. 7—11.
4. Кукса Л. В. Сравнительные исследования неоднородности упругой и пластической деформации//Проблемы прочности. 1986. № 3. С. 59—63.
5. Хакен Г. Синергетика: иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах. М.: Мир, 1985. 423 с.
6. Рыбин В. В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. М.: Metallургия, 1986. 224 с.
7. Лихачев В. А., Волков Л. Е., Шудегов В. Е. Континуальная теория дефектов. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 232 с.

8. *Кадомицев Б. Б.* Динамика и информация//Нелинейные волны. Структуры и бифуркации. М.: Наука, 1987. С. 45—53.
9. *Шустер Г.* Детерминированный хаос: введение. М.: Мир, 1986. 328 с.
10. *Jaynes E. T.* Information Theory and Statistical Mechanics//Physical Review. 1957. V. 106. No. 4. P. 620—630.
11. *Jaynes E. T.* Information Theory and Statistical Mechanics. II//Physical Review. 1957. V. 108. No. 22. P. 171—190.
12. *Джейнс Э. Т.* О логическом обосновании методов максимальной энтропии//Тр. инженеров по электротехнике и радиоэлектронике. 1982. № 9. С. 33—51.
13. *Шеннон К.* Работы по теории информации и кибернетики. М.: Изд-во иностр. лит-ра, 1963. 832 с.
14. *Зубарев Д. Н.* Неравновесная статистическая термодинамика. М.: Наука, 1971. 416 с.
15. Спектральное оценивание. Тематический выпуск//Тр. инженеров по электротехнике и радиоэлектронике. 1982. № 9. 308 с.
16. *Галл С. Ф., Даниэль Д. Д.* Метод максимальной энтропии//Построение изображений по функциям когерентности/Под ред. К. Ван Схонфелда. М.: Мир, 1982. С. 215—222.
17. Image Recovery: Theory and Application/Ed. by H. Stark, New-York: Academic Press, 1987. 544 p.
18. *Трефилов В. И., Моисеев В. Ф., Печковский Э. П. и др.* Деформационное упрочнение и разрушение поликристаллических металлов. Киев: Наук. Думка, 1989. 256 с.
19. *Рокафеллар Р.* Выпуклый анализ. М.: Мир, 1973. 472 с.

Нижний Новгород

Поступила в редакцию
4.IX.1990