Романова В.А., Балохонов Р.Р., Бородина А., Шахиджанов В.С., Лычагин Д.В., Емельянова Е.С., Писарев М. Применение подходов физической теории пластичности при моделировании квазистатической деформации поликристаллов в динамической постановке // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2023. – № 5. С. 57–73. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.06

Romanova V.A., Balokhonov R.R., Borodina A., Shakhidzhanov V.S., Lychagin D.V., Emelianova E.S., Pisarev M. Crystal plasticity finite-element simulations for quasistatic deformation of polycrystals in terms of explicit dynamics. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2023, no. 5, pp. 57-73. DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.06

пермский политех

ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА
№ 5, 2023
PNRPU MECHANICS BULLETIN
https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index



Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2023.5.06
УДК 539.3

ПРИМЕНЕНИЕ ПОДХОДОВ ФИЗИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ПЛАСТИЧНОСТИ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ КВАЗИСТАТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ В ДИНАМИЧЕСКОЙ ПОСТАНОВКЕ

В.А. Романова[1], Р.Р. Балохонов[1], А. Бородина[1,2], В.С. Шахиджанов[1], Д.В. Лычагин[2], Е.С. Емельянова[1], М. Писарев[1]

[1]Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, Томск, Российская Федерация
[2]Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 17 июля 2023 г.
Одобрена: 20 сентября 2023 г.
Принята к публикации: 31 октября 2023 г.

Ключевые слова:

физическая теория пластичности кристаллов, микромеханические модели, поликристаллы, численное моделирование, пластическая деформация.

АННОТАЦИЯ

Модели физической теории пластичности кристаллов в комбинации с явным учетом зеренной структуры являются эффективным инструментом для исследования деформационных процессов в поликристаллических материалах на разных масштабных уровнях. Численное решение краевых задач с учетом морфологических особенностей микроструктуры требует значительных вычислительных ресурсов. Переход к явным схемам интегрирования по времени позволяет эффективно минимизировать вычислительные затраты, при этом обеспечивая квазистатическое решение с высокой степенью точности. В настоящей работе обсуждаются вычислительные аспекты, связанные с применением моделей физической теории пластичности при моделировании процессов квазистатического деформирования поликристаллов в динамической постановке. Приведены соотношения для описания скоростей пластических сдвигов активных систем скольжения, позволяющие эффективно исключить скоростную чувствительность, что является необходимым условием моделирования при искусственно завышенных скоростях деформации. На примере расчетов для моно- и поликристаллов алюминия обсуждаются вопросы тестирования и верификации моделей на микро-, мезо- и макроуровнях.

© ПНИПУ

© **Романова Варвара Александровна** – д. ф.-м. н., гл. науч. сотр. лаборатории механики структурно-неоднородных сред, e-mail: varvara@ispms.ru.
Балохонов Руслан Ревович – д. ф.-м. н., зав. лаб. механики структурно-неоднородных сред, e-mail: rusy@ispms.ru.
Бородина Анжелика – инж. лаб. механики структурно-неоднородных сред, магистрант, e-mail: anzhelika.borodina@ispms.ru.
Шахиджанов Валерий Суренович – инж. лаб. механики структурно-неоднородных сред, e-mail: shakhidzhanov@ispms.ru.
Лычагин Дмитрий Васильевич – д. ф.-м. н., проф., зав. каф. минералогии и геохимии, e-mail: dvl-tomsk@mail.ru.
Емельянова Евгения Сергеевна – мл. науч. сотр. лаборатории механики структурно-неоднородных сред, e-mail: emelianova@ispms.ru.
Писарев Максим – инж. лаб. механики структурно-неоднородных сред, e-mail: pisarev@ispms.ru.

Varvara A. Romanova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Principal Researcher, Laboratory of Mechanics of Non-Homogeneous Materials, e-mail: varvara@ispms.ru.
Ruslan R. Balokhonov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Head of Laboratory, Laboratory of Mechanics of Non-Homogeneous Materials, e-mail: rusy@ispms.ru.
Anzhelika Borodina – Engineer, Laboratory of Mechanics of Non-Homogeneous Materials, e-mail: anzhelika.borodina@ispms.ru.
Valerii S. Shakhidzhanov – Engineer, Laboratory of Mechanics of Non-Homogeneous Materials, e-mail: shakhidzhanov@ispms.ru.
Dmitry V. Lychagin – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Department, e-mail: dvl-tomsk@mail.ru.
Evgeniya S. Emelianova – Junior Researcher, Laboratory of Mechanics of Non-Homogeneous Materials, e-mail: emelianova@ispms.ru.
Maxim Pisarev – Engineer, Laboratory of Mechanics of Non-Homogeneous Materials, e-mail: pisarev@ispms.ru.

Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)
This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

CRYSTAL PLASTICITY FINITE-ELEMENT SIMULATIONS FOR QUASISTATIC DEFORMATION OF POLYCRYSTALS IN TERMS OF EXPLICIT DYNAMICS

V.A. Romanova[1], R.R. Balokhonov[1], A. Borodina[1,2], V.S. Shakhidzhanov[1], D.V. Lychagin[2], E.S. Emelianova[1], M. Pisarev[1]

[1]Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk, Russian Federation
[2]National Research Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 17 July 2023
Approved: 20 September 2023
Accepted for publication:
31 October 2023

Keywords:

crystal plasticity, micromechanical models, polycrystals, numerical simulation, plastic deformation.

ABSTRACT

Crystal plasticity models combined with an explicit consideration of a polycrystalline structure are an effective tool for studying the deformation phenomena throughout length scales. A numerical solution to the boundary-value problems with an explicit account for misrostructural features requires extensive computational resources. The use of explicit time integration schemes effectively reduces computational costs yet providing a quasistatic solution with a high degree of accuracy. In this paper, we discuss the numerical aspects of crystal plasticity finite element simulations of quasistatic deformation phenomena in terms of explicit dynamics. The equations for plastic strain rate are formulated in a way to minimize strain rate sensitivity, which is the necessary condition for simulating quasistatic deformation at artificially high strain rates. The problems of model verification and testing at the micro, meso, and macroscales are discussed using the example of aluminum single- and polycrystals.

© PNRPU

Введение

Большинство современных конструкционных материалов имеет поликристаллическое строение и характеризуется анизотропией механических свойств на уровне кристаллической решетки. Перспективными для описания деформационного поведения таких материалов являются модели физической теории пластичности кристаллов (ФТПК), учитывающие упругопластическую анизотропию свойств, обусловленную кристаллическим строением [1–7].

Модели ФТПК можно условно разделить на две группы. Первая группа имеет целью построение определяющих соотношений для описания макроскопического осредненного отклика материала с учетом аддитивных вкладов в деформацию зерен с различной ориентацией [1–5]. В последнее десятилетие XX в. появились более сложные модели этого типа, позволяющие учитывать вклады с различных масштабов, например с мезоуровня. Определяющие соотношения, формируемые на основе многоуровневых подходов, определяют связь макроскопических характеристик напряженно-деформированного состояния (НДС) с учетом вкладов структурных изменений на микро- и мезоуровнях, которые вводятся неявным образом. Большой вклад в развитие подобных моделей принадлежит научной школе П.В. Трусова [3–5]. Достоинством многоуровневых конститутивных моделей является возможность физически обоснованного прогноза поведения поликристаллических материалов и конструкций в процессе деформирования с учетом эволюции структуры и текстуры (см. например, [8]).

Другой класс моделей ФТПК предполагает решение краевых задач с явным учетом морфологических и кристаллографических особенностей структуры материала на масштабе рассмотрения [6; 7; 9]. Такие модели позволяют в явном виде исследовать эволюцию локальных характеристик НДС, которые могут на порядок превышать средний уровень напряжений и деформаций в нагруженном материале. Информация, полученная в численных экспериментах, может быть использована для выработки рекомендаций по оптимизации механических свойств материалов путем модификации структуры.

На сегодняшний день примеры оптимизации структуры и свойств на основе численного анализа с учетом структурных особенностей наиболее широко представлены для композиционных материалов, где варьируемыми параметрами являются форма, размер, объемная доля, пространственное распределение упрочняющих частиц, волокон и т.д. Появление аддитивных технологий существенно расширило возможности получения управляемой структуры и свойств материалов также и для металлических изделий, включая функциональные материалы и покрытия. Важной составляющей такого анализа является построение моделей деформационного поведения с учетом структурных особенностей.

В настоящей работе описывается подход ФТПК к моделированию деформационного поведения поликристаллических сплавов с явным учетом зеренной структуры. Задачи микро- и мезомеханики, учитывающие микроструктуру материала, требуют привлечения высоких вычислительных мощностей. С одной стороны, для реалистичного воспроизведения деформационных процессов на микро- и мезоуровнях расчетный объем должен быть представительным и содержать достаточное количество структурных элементов. С другой стороны, структурные элементы и приграничные области долж-

ны аппроксимироваться достаточно подробными сетками для обеспечения приемлемой точности решения. Необходимость использования сеток высокого разрешения для решения подобных задач делает актуальной проблему минимизации вычислительных затрат без потери информативности и точности.

Одним из подходов, позволяющих минимизировать требования к дисковому пространству, оперативной памяти и быстродействию вычислительной техники при решении задач квазистатики, является замена уравнений равновесия на уравнения движения гиперболического типа [9–12], что позволяет перейти от неявных схем интегрирования по времени к явным, имеющим существенные преимущества с точки зрения вычислительных затрат.

В настоящей работе изложен подход к моделированию квазистатического деформирования поликристаллов в динамической постановке с использованием моделей ФТПК. Далее, в разделе 1, приводится общая математическая постановка задачи и обсуждаются проблемы эффективной численной реализации. В разделе 2 на примере алюминиевого сплава с гранецентрированной кубической решеткой (ГЦК) рассмотрены вопросы тестирования, верификации и валидации моделей на микро-, мезо- и макроуровнях.

1. Математическое описание модели и особенности численной реализации

1.1. Постановка краевой задачи

Основными уравнениями в динамической постановке задачи, описывающими движение точек деформируемой среды в полях внешних воздействий без учета массовых сил, являются уравнения движения

$$\rho \dot{u}_i = \sigma_{ij,j}\,, \tag{1}$$

неразрывности

$$\frac{\dot{V}}{V} - u_{i,i} = 0 \tag{2}$$

и кинематические соотношения для тензора скоростей полных деформаций

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(u_{i,j} + u_{j,i}\right), \tag{3}$$

где u_i – компоненты вектора скорости; $V = \dfrac{\rho}{\rho_0}$ – относительный объем; ρ и ρ_0 – текущая и начальная плотности материала; σ_{ij} и ε_{ij} – компоненты тензоров напряжений и полных деформаций, точка над символом обозначает производную по времени, запятая между нижними индексами – частную производную по соответствующим координатам.

В общем случае относительное движение точек сплошной среды может быть разложено на деформацию и жесткий поворот [1–3]. Поле деформаций связано определяющими соотношениями с полем напряжений, в то время как жесткий поворот не вызывает изменения напряженного состояния. В случае конечных деформаций вопрос о корректном разложении движения на деформацию и поворот является одним из основных (см. например, [13]). В настоящей работе мы ограничим рассмотрение случаем малых упругих деформаций, характерных для большинства металлов. В этом случае для корректировки напряженного состояния с учетом поправки на поворот корректно использовать производную Яумана:

$$\dot{S}^*_{ij} = \dot{S}_{ij} - S_{ik}\omega_{jk} - S_{jk}\omega_{ik}\,, \tag{4}$$

где $\omega_{ij} = \dfrac{1}{2}\left(u_{i,j} - u_{j,i}\right)$ – компоненты спина; S_{ij} – компоненты девиатора напряжений.

В качестве определяющих соотношений, задающих связь между компонентами тензоров напряжений и деформаций, используется обобщенный закон Гука в скоростной форме

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}\dot{\varepsilon}^e_{kl}\,, \tag{5}$$

где $\dot{\varepsilon}^e_{ij}$ – компоненты тензора скоростей упругих деформаций; C_{ijkl} – матрица упругих модулей.

Граничные условия, задающие внешнее воздействие, могут быть либо кинематическими, когда на поверхности тела заданы перемещения или скорости, либо статическими, когда на поверхности тела заданы поверхностные силы. Граничные условия в напряжениях имеют вид

$$\sigma_{ij} n_j\big|_{S_\sigma} = T_i\,, \tag{6}$$

где S_σ – поверхность или ее часть; T_i и n_i – компоненты векторов поверхностных сил и нормали к поверхности соответственно. Кинематические граничные условия в случае динамической постановки задачи задаются в скоростях:

$$u_i\big|_{S_u} = \upsilon_i\,, \tag{7}$$

где υ_i – заданные значения компонент вектора скорости на поверхности S_u. Как правило, кинематические граничные условия отражают условия закрепления или движения точек поверхности относительно заданного направления.

Численное решение динамических задач с использованием явных схем сквозного счета предполагает, что изменение напряженно-деформированного состояния рассчитывается на каждом шаге по времени, а механическое возмущение в виде волны передается от элемен-

та к элементу [12]. Такие схемы являются условно устойчивыми. Условие устойчивости накладывает ограничение на величину шага по времени таким образом, чтобы расстояние, которое проходит упругая волна за один временной шаг, не превышало минимальный размер элементов расчетной сетки. Иными словами, шаг по времени пропорционален шагу по пространству и обратно пропорционален скорости распространения упругого возмущения с коэффициентом пропорциональности меньше единицы. Определенный таким образом временной шаг является очень малой величиной, что делает нецелесообразным и фактически невозможным моделирование процессов деформации в рамках реальных временных интервалов при квазистатических скоростях. Как правило, скорости нагружения при моделировании квазистатических процессов в динамической постановке искусственно завышаются на несколько порядков.

В работах [10; 11] были определены условия, при которых динамическая постановка краевых задач обеспечивает квазистатическое решение с высокой степенью точности. Условием этого является минимизация инерционных членов, входящих в уравнения движения. Основной вклад ускорение вносит на начальном этапе нагружения, где скорость изменяется до заданного амплитудного значения. Минимизировать ускорение на данном этапе позволяет плавное увеличение скорости, исключающее резкие скачки. При постоянной скорости нагружения влияние ускорения практически сводится к нулю, и, при условии использования моделей материалов нечувствительных к скорости нагружения, квазистатическая и динамическая постановка должны обеспечивать одинаковые решения.

1.2. Определяющие соотношения физической теории пластичности

Будем записывать определяющие соотношения относительно ортогональной системы координат, связанной с определенными направлениями в кристаллической решетке. В кубических кристаллах в качестве координатных осей выбирают направления [100], [101] и [001], в гексагональных – [210], [010] и [001].

Модели ФТПК для случая конечных деформаций предполагают мультипликативное разложение градиента деформации на упругую и пластическую составляющие, что означает переход из начального недеформированного состояния в конечное в два этапа [1; 3–5]. Первый этап связан с необратимой деформацией сдвига, а второй этап – с упругой деформацией и жестким поворотом кристаллической решетки. В рамках ФТПК подразумевается, что необратимое скольжение дислокаций отвечает за сдвиг решетки, а обратимая упругая деформация — за растяжение и поворот решетки. Двумя основными проблемами при формулировке модели для конечных деформаций являются корректное определение поворота и построение моделей пластической деформации, учитывающих физические механизмы дислокационной пластичности [13].

Теория существенно упрощается в предположении малых упругих деформаций. В этом случае определенные математические выкладки приводят к аддитивной декомпозиции скоростей деформации на упругую и пластическую составляющие [1]:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}^e_{ij} + \dot{\varepsilon}^p_{ij}, \tag{8}$$

где $\dot{\varepsilon}^p_{ij}$ – компоненты тензора скоростей пластических деформаций.

С учетом этого закон Гука (5) принимает вид:

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl}\left(\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}^p_{kl}\right). \tag{9}$$

Соотношение (3) для скоростей полных деформаций являются чисто кинематическими и не связаны с механизмами деформации в конкретных материалах. В отличие от этого, определение скоростей пластических деформаций $\dot{\varepsilon}^p_{ij}$ требует построения моделей, которые зависят от свойств материала, условий нагружения, структурных особенностей и т.д. В настоящее время предложено большое количество моделей, построенных на основе феноменологических и физических соображений. Обзоры некоторых из них приведены, например, в [2].

В металлах на уровне кристаллической решетки сдвиги могут происходить только по определенным плоскостям и в определенных направлениях. Совокупность возможных комбинаций плоскостей и направлений сдвига составляет системы скольжения кристалла. В соответствии с законом Шмида, система скольжения α становится активной при условии, что приложенное к ней сдвиговое напряжение $\tau^{(\alpha)}$ достигнет критического значения τ_{CRSS} (от англ. Critical Resolved Shear Stress). В рамках моделей ФТПК компоненты тензора пластических деформаций связаны со сдвигами на активных системах скольжения геометрическими соотношениями:

$$\dot{\varepsilon}^p_{ij} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \theta^{(\alpha)}_{ij}, \tag{10}$$

здесь $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ – скорость пластических сдвигов в системе скольжения α, $\theta^{(\alpha)}_{ij}$ – ориентационный тензор, задающий ориентацию системы скольжения через компоненты векторов направления скольжения s_i и нормали к плоскости скольжения m_i в системе координат кристалла:

$$\theta^{(\alpha)}_{ij} = \frac{1}{2}\left(s_i m_j + s_j m_i\right)^{(\alpha)}. \tag{11}$$

Скорость пластических сдвигов $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$, входящая в (10), определяется действующим напряжением сдвига на данной системе скольжения

$$\tau^{\alpha} = s_i \sigma_{ij} m_j . \qquad (12)$$

В случае более шести потенциально активных систем скольжения в определении скоростей пластических деформаций возникают сложности, поскольку набор действующих систем скольжения, обеспечивающих одно и то же напряженно-деформированное состояние, не является единственным. Вопросам определения активных систем скольжения из возможного набора и определению сдвигов на них посвящено большое количество работ (см, например, [15]). Тэйлор [16] предложил осуществлять выбор активных систем скольжения на основе принципа минимума диссипации энергии, то есть принципа минимальной внутренней работы. Позднее Бишоп и Хилл [17] показали, что это эквивалентно максимуму работы пластической деформации при условии одинакового упрочнения на всех системах скольжения. В рамках данного подхода были предложены различные модели упругопластического поведения материалов, нечувствительных к скорости нагружения [2; 18–20]. Однако численная реализация таких моделей является достаточно затратной ввиду необходимости перебора всех возможных комбинаций систем скольжения.

Другой подход, позволяющий преодолеть неоднозначность выбора систем скольжения и определения пластических сдвигов, основан на применении вязкопластических моделей (см., например, обзоры [2; 19]. В этом случае скорости пластических сдвигов определяются как функции напряжений вида

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = f\left(\frac{\left|\tau^{(\alpha)}\right|}{D^{(\alpha)}}\right)\operatorname{sign}\left(\tau^{(\alpha)}\right), \qquad (13)$$

где $D^{(\alpha)} = g\left(\tau^{(\alpha)}_{CRSS}, \gamma^{(\beta)}, T, ...\right)$ – сопротивление сдвигу в системе скольжения α; f – функция, вид которой должен быть определен для каждого конкретного материала, условий нагружения и т.д. Во многих работах эта функция выбиралась в виде степенного закона

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \left|\frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}_{CRSS}}\right|^{\nu} \operatorname{sign}\left(\tau^{(\alpha)}\right), \qquad (14)$$

где $\dot{\gamma}_0$ – начальная скорость сдвига; ν – параметр скоростной чувствительности.

Наряду с феноменологическими моделями, для описания скоростей пластических сдвигов были разработаны физически обоснованные модели на основе дислокационной кинетики. Основным параметром таких моделей является плотность дислокаций, которая эволюционирует в процессе нагружения. Различные варианты дислокационных кинетик были предложены в работах [21–23]. Отдельно следует выделить группу работ, основанных на введении в рассмотрение геометрически необходимых дислокаций [23; 24]. В отличие от феноменологических локальных подходов, в которых напряженное состояние полностью определяется деформированным состоянием в данной точке, нелокальные подходы основаны на понятии градиента деформации. Таким образом, в модели вводится масштабный фактор. Это, в частности, позволяет избавиться от зависимости ширины полос локализации пластической деформации от шага расчетной сетки при решении краевых задач.

Наконец, особо следует остановиться на моделях, исключающих скоростную чувствительность за счет зависимости скорости пластических сдвигов от скорости приложенной деформации. Впервые такая модель была предложена в [26] и применена в работах [27; 28] для моделирования циклического нагружения в терминах малых и конечных деформаций. В этом случае выражение для скорости пластических сдвигов принимает вид

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\varepsilon}_{eq} f\left(\tau^{(\alpha)}, \tau_{CRSS}\right)\operatorname{sign}(\tau^{(\alpha)}), \qquad (15)$$

где $\dot{\varepsilon}_{eq}$ – интенсивность девиатора скорости деформаций. Далее покажем, что применение моделей такого типа позволяет практически полностью исключить влияние скорости нагружения на характеристики НДС на макро- и мезоуровнях, что является необходимым условием при моделировании квазистатических задач в динамической постановке.

В приведенных далее примерах моделирования квазистатических процессов в динамической постановке для описания деформационного отклика алюминиевых моно- и поликристаллов использовались определяющие соотношения (8)–(9) для случая малых упругих деформаций, что является обоснованным для большинства металлов. Компоненты тензора скоростей пластических деформаций определялись из соотношений (10)–(12). Скорость пластических сдвигов на активных системах скольжения определялась из соотношения типа (15) для минимизации скоростной чувствительности (более подробное описание приводится в разделе 2).

1.3. Особенности численной реализации

Краевая задача (1)–(7) может быть решена численно методом конечных разностей или методом конечных элементов. При использовании явных схем интегрирования по времени эти два метода обеспечивают практически одинаковые результаты. Независимо от численного метода, формулировка задачи предполагает введение двух систем координат, одна из которых связана с геометрической моделью образца, а другая – с направлением кристаллографических осей в материале. Уравнения (1)–(3) и граничные условия (6)–(7) формулируются в системе координат образца, а определяющие соотношения ФТПК формулируются в системе координат кристалла. В этом случае вид соотношений (9)–(12) зависит исключительно от кристаллографии и существенно упрощается во многих случаях в результате присущей кристаллам симметрии.

Для случая, когда кристаллографическая система координат не совпадает с глобальной, численное решение системы уравнений (1)–(13) осложняется необходимостью определения компонент тензоров и векторов в разных системах координат. Формулы преобразования для компонент тензора второго ранга при повороте системы координат определяются следующим образом:

$$T'_{ij} = R_{ki} R_{lj} T_{kl}, \tag{16}$$

где T'_{ij} и T_{ij} – компоненты тензора, записанные в новой и старой системе координат соответственно, а R_{ij} – компоненты матрицы поворота. Обратный переход компонент тензора осуществляется с использованием формул обратного преобразования:

$$T_{ij} = R_{ik} R_{jl} T'_{kl}. \tag{17}$$

Общий алгоритм численного решения можно описать следующим образом:

1. Поле скоростей, полученное из решения уравнений движения (1) в системе координат образца, используется для расчета скоростей полных деформаций (3).

2. Компоненты тензора полных деформаций приводятся к системе координат кристалла с помощью формул преобразования (16) и используются в расчете определяющих соотношений ФТПК (9)–(13).

3. Полученные компоненты тензора напряжений преобразуются к системе координат образца с помощью формул обратного преобразования (17) и используются в расчете уравнения движения (1) на следующем временном шаге.

Такая процедура выполняется для всех элементов расчетной сетки на каждом временном шаге. Следует отметить, что кристаллографическая система координат в каждом элементе испытывает жесткий поворот вместе с материалом, оставаясь при этом ортогональной.

Остановимся кратко на особенностях численной реализации с использованием конечно-элементного пакета ABAQUS/Explicit [12]. Определяющие соотношения ФТПК не входят в базу данных основного пакета и вводятся в расчеты с помощью процедуры пользователя VUMAT. На этапе создания геометрической модели конечные элементы ассоциируются с ортогональными системами координат, задающими ориентации кристаллографических осей. Расчет определяющих соотношений в ABAQUS/Explicit по умолчанию осуществляется относительно этих локальных систем координат, которые в процессе нагружения поворачиваются вместе с материалом.

В качестве объективной производной в расчетах с использованием процедуры пользователя VUMAT используется производная Нагди – Грина. В связи с этим результаты расчетов, полученные с помощью VUMAT, могут незначительно отличаться от таковых, полученных по встроенным моделям ABAQUS, где используется производная Яумана. Однако эта разница проявляется лишь для гиперупругих материалов, испытывающих большие конечные деформации и повороты. Следует отметить, что корректировка напряженного состояния с учетом жесткого поворота в ABAQUS/Explicit происходит вне процедуры расчета определяющих соотношений VUMAT, в отличие от неявных схем, где вычисление поворота должно быть выполнено в процедуре пользователя UMAT.

В общем случае решение определяющих соотношений (9)–(13) требует привлечения итеративных методов, поскольку компоненты тензора напряжений входят в правую и левую часть. Однако в частных случаях при использовании для определения $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ соотношений типа (15) можно разрешить уравнения относительно компонент тензора напряжений. Еще раз подчеркнем, что описанная здесь процедура численной реализации специфична для решения задач в динамической постановке с использованием явных схем интегрирования по времени.

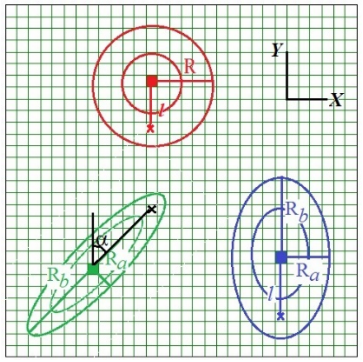
1.4. Моделирование поликристаллических структур

Создание трехмерной модели структуры является нетривиальной задачей, поскольку требует наличия данных о структуре материала не только на поверхности, но и во всем объеме образца. Экспериментальные методы, позволяющие получить подобную информацию, основаны на послойном сканировании либо воспроизведении структуры путем последовательного снятия поверхностных слоев, сопровождающегося микроструктурным анализом. Альтернативой экспериментальным методам является численное моделирование микроструктур с геометрическими характеристиками, соответствующими реальным материалам (форма, размер, объемная доля и пространственное распределение структурных элементов).

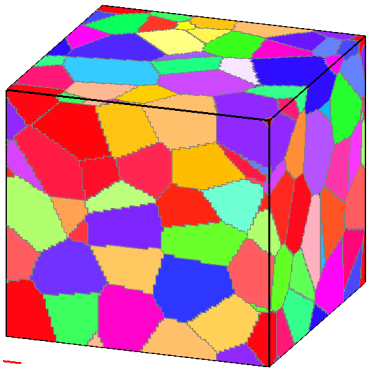
Для генерации трехмерных структур с широким спектром геометрических характеристик в [29; 30] был предложен метод пошагового заполнения (step-by-step packing (SSP)), основанный на комбинации аналитических методов и имитационного моделирования. В случае моделирования поликристаллических структур процедура SSP-генерации включает в себя следующие этапы. 3D-объем дискретизируется регулярной или нерегулярной сеткой. Определенные элементы сетки выбираются в качестве «зародышей» будущих зерен. Каждый вид зародышей связан с определенной аналитической функцией, согласно которой объем вокруг центра зарождения инкрементально увеличивается в процессе генерации. Каждое зерно растет за счет присоединения элементов сетки, координаты которых попадают в растущую область. Генерация продолжается до тех пор, пока растущие зерна не заполнят заданный объем.

Основными параметрами, управляющими морфологическими характеристиками конечной зеренной струк-

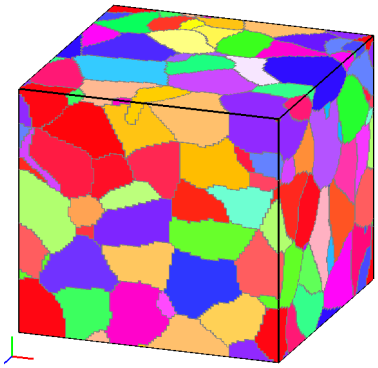
туры, являются количество зародышей разного типа, их пространственное распределение, а также законы роста. Уравнения эллипсоидов, сфер и др. являются основными аналитическими функциями, позволяющими строить поликристаллические структуры, характерные для многих металлов (рис. 1, *a*).



a



b



c

Рис. 1. Схема роста зерен [30] (*a*) и примеры структур, сгенерированных с использованием с законов роста (18) (*b*) и (19) (*c*)

Fig. 1. Schematic representation of the SSP grain growth [30] (*a*) and the examples of polycrystalline structures generated using growth laws defined by Eqs. (18) (*b*) and (19) (*c*)

В качестве примера на рис. 1 (*b*, *c*) приведены поликристаллические структуры, сгенерированные для одного и того же распределения зародышей с использованием разных законов роста. Для генерации структуры на рис. 1, *b*, зерна росли в соответствии со сферическим законом. Условие присоединения *j*-го элемента с координатами x_i^j к *n*-му зерну с координатами центра зарождения x_i^n определяется соотношением

$$\left(x_1^i - x_i^n\right)^2 + \left(x_2^i - x_2^n\right)^2 + \left(x_3^i - x_3^n\right)^2 \le R^n, \qquad (18)$$

где радиус R^n на каждом шаге процедуры генерации увеличивается на величину Δr^n. Для того, чтобы избежать появления грубых ступенчатых границ раздела, максимальный инкремент Δr должен быть в 3–4 раза меньше шага сетки. Зерна, сгенерированные таким образом, представляют собой многогранники с плоскими гранями, аналогичные мозаике Вороного.

Интересным представляется случай использования уравнения роста зерен в виде

$$\left(\frac{\tilde{x}_1^j - x_i^n}{a_1}\right)^4 + \left(\frac{\tilde{x}_2^j - x_i^n}{a_2}\right)^4 + \left(\frac{\tilde{x}_3^j - x_i^n}{a_3}\right)^4 \le 1, \qquad (19)$$

где a_1 – константы, определяющие соотношения сторон растущего зерна. В случае использования закона роста (19) зерна представляют собой многогранники сложной формы с выпуклыми и вогнутыми гранями, что характерно для многих поликристаллических сплавов. Пример такой структуры приведен на рис. 1, *c*.

Модели структур, сгенерированные методом пошагового заполнения на заданных сетках, по сути уже являются конечно-элементными моделями, которые могут быть импортированы в КЭ-расчеты. Зерно представляет собой набор элементов с одинаковыми структурными индексами. С каждым зерном ассоциируется набор углов Эйлера, задающих ориентацию кристаллографических осей в данном зерне относительно системы координат образца. Кристаллографические ориентации зерен могут быть заданы, например, на основе экспериментальных данных, полученных методом дифракции обратно рассеянных электронов (EBSD).

В качестве начальных условий предполагается, что все зёрна имеют одинаковые физико-механические характеристики (плотность, упругие модули, начальные напряжения сдвига, активирующие дислокационное скольжение и др.) и отличаются только ориентацией локальных систем координат, связанных с кристаллографическими осями.

Следует подчеркнуть, что использованный здесь метод пошагового заполнения предназначен для генерации поликристаллических структур с заданными геометрическими характеристиками, известными из экспериментов. Он основан на использовании чисто геометрических соотношений, лишь имитирующих физические механизмы эволюции структуры. Для описания эволюции микроструктуры с учетом процессов кристаллизации, рекристаллизации, образования новых фаз и т.д. необходимо использовать принципиально иные модели, построенные в рамках термодинамических подходов.

2. Тестирование, верификация и валидация моделей на микро-, мезо- и макроуровнях

2.1. Определяющие соотношения ФТПК для алюминиевого сплава

Изложенный подход к моделированию деформационного поведения поликристаллов позволяет описать процессы на микро-, мезо- и макромасштабных уровнях в рамках единой модели. Деформационные механизмы микроуровня, обусловленные особенностями кристаллического строения и дислокационного скольжения, вводятся в рассмотрение через определяющие соотношения ФТПК. При этом явно движение отдельных дислокаций не рассматривается, но учитывается их осредненный вклад в пластическую деформацию через феноменологические соотношения (10)–(15). Процессы мезоуровня, обусловленные коллективным вкладом и взаимодействием групп зерен, моделируются явно, путем введения зеренной структуры. На этом уровне рассмотрения НДС характеризуется существенной неоднородностью и появлением областей локализации деформации и концентрации напряжений, связанных с наличием границ раздела. Наконец, осредненные по объему характеристики НДС отражают макроскопический отклик материала при условии, что данный объем содержит достаточное количество зерен, чтобы быть представительным.

Рассмотрим вопросы тестирования и верификации моделей на разных масштабных уровнях на примере алюминия, характеризующегося ГЦК-решеткой. Тензор упругих модулей кубических кристаллов включает 12 ненулевых констант, из которых только три являются независимыми, в результате чего соотношения закона Гука (9), записанные в системе координат кристалла, принимают вид

$$\dot{\sigma}_{11} = C_{1111}\left(\dot{\varepsilon}_{11} - \dot{\varepsilon}^p_{11}\right) + C_{1122}\left(\dot{\varepsilon}_{22} - \dot{\varepsilon}^p_{22}\right) + C_{1122}\left(\dot{\varepsilon}_{33} - \dot{\varepsilon}^p_{33}\right),$$

$$\dot{\sigma}_{22} = C_{1111}\left(\dot{\varepsilon}_{22} - \dot{\varepsilon}^p_{22}\right) + C_{1122}\left(\dot{\varepsilon}_{11} - \dot{\varepsilon}^p_{11}\right) + C_{1122}\left(\dot{\varepsilon}_{33} - \dot{\varepsilon}^p_{33}\right),$$

$$\dot{\sigma}_{33} = C_{1111}\left(\dot{\varepsilon}_{33} - \dot{\varepsilon}^p_{33}\right) + C_{1122}\left(\dot{\varepsilon}_{11} - \dot{\varepsilon}^p_{11}\right) + C_{1122}\left(\dot{\varepsilon}_{22} - \dot{\varepsilon}^p_{22}\right), \quad (20)$$

$$\dot{\sigma}_{12} = 2C_{2323}\left(\dot{\varepsilon}_{12} - \dot{\varepsilon}^p_{12}\right),$$

$$\dot{\sigma}_{12} = 2C_{2323}\left(\dot{\varepsilon}_{12} - \dot{\varepsilon}^p_{12}\right),$$

$$\dot{\sigma}_{12} = 2C_{2323}\left(\dot{\varepsilon}_{12} - \dot{\varepsilon}^p_{12}\right).$$

Кристаллы ГЦК характеризуются 12 потенциально активными системами скольжения {111}<110>. Критические напряжения, инициирующие сдвиг на системе скольжения α, будем определять через простое феноменологическое соотношение [31]

$$\tau^{(\alpha)}_{CRSS} = \tau_0 + \tau^{HP} + \left(\tau_1 + \eta_1 \varepsilon^p_{eq}\right)\left(1 - \exp\left(-\varepsilon^p_{eq}\eta_0 / \tau_1\right)\right), \quad (21)$$

где τ_0 – критическое начальное напряжение сдвига монокристалла, одинаковое для всех систем скольжения; τ^{HP} – увеличение начального напряжения сдвига за счет зернограничного упрочнения в поликристаллах (закон Холла – Петча [32]). Третий член суммы в правой части (21) учитывает деформационное упрочнение как функцию от интенсивности накопленной пластической деформации, где коэффициенты аппроксимации подбираются по экспериментальным кривым нагружения. В приведенных расчетах использовались следующие константы и параметры модели: C_{1111}=108 ГПа, C_{1122}=61 ГПа, C_{2323}=28 ГПа, τ_0=2 МПа, τ^{HP}=33 МПа, τ_1=35 МПа, η_1=30 МПа η_0=760 МПа.

2.2. Расчеты нагружения монокристаллов

Верификацию модели на микроуровне и тестирование корректности численной реализации определяющих соотношений целесообразно проводить на монокристаллах. Проиллюстрируем это на примере тестовых расчетов для монокристаллов алюминия 3×6×3 мм^3 с боковыми гранями $(\bar{1}10)$ и (001), нагруженных вдоль направления [110], модели которых были построены на основе экспериментальных данных [33] (рис. 2).

На верхней поверхности задавались условия сжатия вдоль оси Y||[001], имитирующие контакт с подвижным пуансоном. Смещения на нижней поверхности в направлении оси нагружения были запрещены, что соответствовало контакту с неподвижным пуансоном. Для исследования влияния трения были рассмотрены два крайних случая – идеальное скольжение или жесткое ограничение смещений и поворотов в плоскости поверхностей контакта с пуансонами.

Для монокристаллов τ^{HP} в (21) принимается равным нулю. При отсутствии деформационного упрочнения (третий член суммы в (21) равен нулю) пластическая деформация быстро локализуется в полосах, соответствующих линиям пересечения одной или нескольких плоскостей скольжения с поверхностями образца. В этом случае сравнение картин локализации с аналитически ожидаемыми следами скольжения является одним из способов тестирования корректности численной реализации определяющих соотношений. На рис. 2, *b*, *c*, приведены картины локализации пластической деформации в монокристаллах без упрочнения. При ориентации оси сжатия [110] сдвиг может происходить по двум плоскостям и по двум направлениям в каждой плоскости. Четыре октаэдрические системы скольжения являются равнонагруженными относительно оси сжатия, и пластическое течение в них должно начинаться при одном и том же уровне приложенных напряжений. В соответствии с кристаллографической схемой (см. рис. 2, *a*) линии пересечения плоскостей октаэдрического сдвига со свободными боковыми поверхностями {110} расположены под углом к оси нагружения, а на поверхностях {100} – горизонтально.

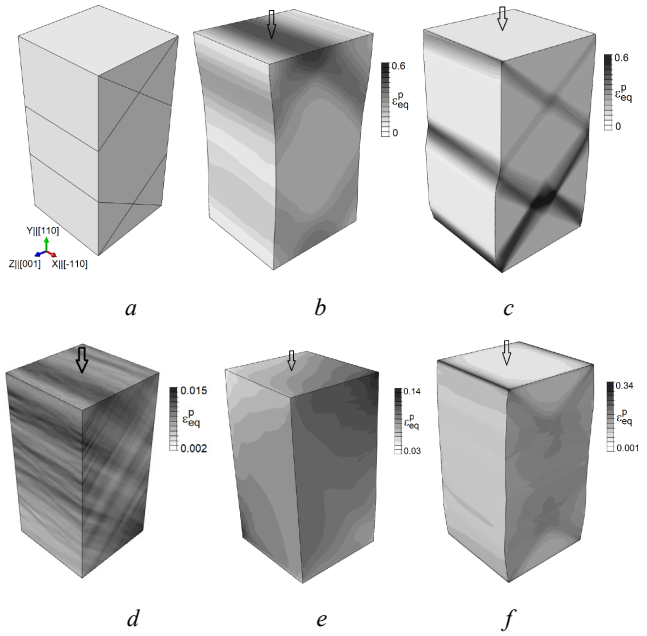


Рис. 2. Расчеты сжатия монокристаллов алюминия с боковыми гранями $(\bar{1}10)$ и (001): кристаллографическая схема (*a*) и поля эквивалентных пластических деформаций (*b*–*f*) в моделях без учета (*b*, *c*) и с учетом упрочнения (*d*–*f*) и условиями идеального скольжения (*b*, *d*, *e*) или отсутствия скольжения (*c*, *f*) на верхней и нижней поверхностях; сжатие вдоль направления [110] до 0,6 % (*d*) и 6 % (*b*–*c*, *e*–*f*)

Fig. 2. Calculation results for aluminum single crystals with $(\bar{1}10)$ and (001) latteral faces: crystallographic scheme (*a*), equivalent plastic strain fields (*b*–*f*) obtained in the calculations with (*d*–*f*) and without strain hardening (*b*, *c*), and with (*b*, *d*, *e*) and without friction (*c*, *f*) on the top and bottom surfaces; compression along the [110] direction to a strain of 0,6 % (*d*) and 6 % (*b*–*c*, *e*–*f*)

Подтверждением корректности модели также может служить соответствие напряжений течения, полученных в численных расчетах, аналитическим значениям, полученным из закона Шмида:

$$\sigma_y = \frac{\tau_0}{F}, \qquad (22)$$

где τ_0 – сдвиговое напряжение начала пластического течения на активной системе скольжения, σ_y – предел текучести, F – фактор Шмида. Предел текучести в модельных образцах определяется по кривым нагружения, построенным в виде зависимости средних напряжений Мизеса, $<\sigma_{eq}>$, от деформации образца вдоль оси нагружения, ε. Для осреднения напряжений применяется соотношение

$$<\sigma_{eq}>=\frac{\sum\limits_{N}\left(\sigma_{eq}V\right)_i}{\sum\limits_{N}V_i}, \qquad (23)$$

где V_i – объем *i*-го элемента, N – количество элементов в расчетной области, а деформация рассчитывается по смещениям поверхностей нагружения как

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0}, \qquad (24)$$

где l_0 и l – начальная и текущая длина образца вдоль оси нагружения. В расчетах, проведенных в [34] для монокристаллов с разной ориентацией, относительная погрешность пределов текучести, полученных в КЭ-расчетах и из соотношения (22), составила менее 2,5 % в зависимости от условий нагружения.

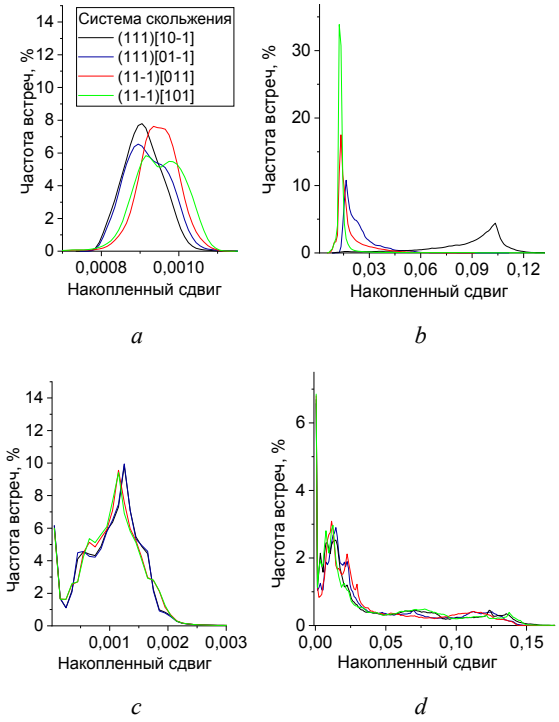


Рис. 3. Частотные распределения накопленных пластических сдвигов на активных системах скольжения при сжатии модельных монокристаллов алюминия (рис. 2) до 0,6 % (*a*, *c*) и 6 % (*b*, *d*) при условии идеального скольжения (*a*, *b*) или отсутствия скольжения (*c*, *d*) на верхней и нижней поверхностях

Fig. 3. Frequency count distributions of the slip accumulated on active slip systems in aluminum single crystals under compression up to a strain of 0.6% (*a*, *c*) and 6% (*b*, *d*) with (*a*, *b*) and without friction (*c*, *d*) on the top and bottom surfaces

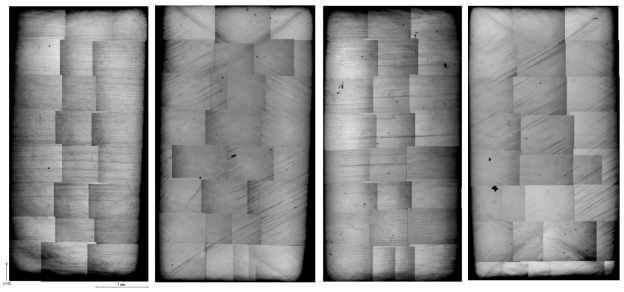
В [34] было показано, что при отсутствии деформационного упрочнения в монокристаллах с осями сжатия [100] и [110] можно выделить две характерные стадии развития пластической деформации. Первая стадия характеризовалась макроскопически квазиоднородной деформацией, обеспеченной последовательным вовлечением в пластическое течение различных областей кристалла, где скольжение могло происходить по одной или по нескольким активным системам. Вторая стадия характеризовалась макроскопическим изменением формы образца, сопровождающимся локализацией пластической деформации в макрополосе, ориентация которой связана с геометрией образца и условиями нагружения. При этом в результате разворота кристалла относитель-

но оси нагружения в некоторых областях монокристалла активировались системы скольжения, не работающие при начальной ориентации.

Наличие упрочнения существенно меняет характер развития пластической деформации. Хотя и в этом случае развитие пластической деформации характеризуется стадийностью, первая стадия, на которой образец сохраняет симметричную форму за счет попеременного вовлечения в пластическую деформацию различных областей, является более длительной, чем в кристаллах с идеальной пластичностью. В результате упрочнения, происходящего в области пластического деформирования, напряжения, необходимые для реализации скольжения, увеличиваются. В результате скольжение в данной области прекращается и активируется в прилегающих областях. Таким образом пластическая деформация распространяется по кристаллу в виде фронтов от одного пуансона к другому и обратно (см. рис. 2, *d*). Образование и развитие сдвигов происходит во фронте, а за фронтом пластическая деформация замедляется или прекращается совсем. При этом попеременно работают сопряженные системы скольжения, обеспечивая тем самым сохранение симметричной формы образца. Для кристаллов некоторых ориентаций макролокализации предшествовала промежуточная стадия, связанная с интенсивным множественным скольжением, происходящим одновременно в нескольких областях кристалла. Заключительная стадия деформирования в монокристаллах с упрочнением, как и в случае идеальной пластичности, была связана с макроскопическим формоизменением и поворотом оси образца (см. рис. 2, *e*).

Существенное влияние на характер локализации пластической деформации в монокристаллах оказывают граничные условия, имитирующие присутствие или отсутствие трения на поверхностях контакта с пуансонами. На рис. 2, *b*, *e*, и рис. 2, *c*, *f*, приведены расчеты для двух крайних случаев, когда смещения и повороты в узлах верхней и нижней поверхностей не ограничивались или, напротив, были запрещены в направлениях перпендикулярно оси растяжения. В случае идеального скольжения (см. рис. 2, *b*, *e*) образец сдвигается и поворачивается в процессе сжатия, что приводит к быстрому нарушению симметрии в распределении пластических деформаций и быстрому переходу к стадии макроскопического формоизменения. Этот вывод подтверждается изменением вкладов в деформацию сдвигов на активных системах скольжения в процессе деформирования. Частотные распределения накопленных сдвигов на четырех первичных системах скольжения уже в начале деформирования демонстрируют отличия, которые становятся еще более существенными в процессе дальнейшего сжатия (см. рис. 3, *a*, *b*). Ограничение смещений и поворотов на плоскостях контакта с пуансонами фактически фиксирует ось нагружения и обеспечивает сохранение симметрии формы кристалла относительно этой оси. Соответствующие частотные распределения накопленных сдвигов показывают, что все активные системы скольжения вносят примерно одинаковый вклад в пластическую деформацию на всем протяжении сжатия (см. рис. 3, *c*, *d*).

Наиболее важным этапом валидации модели является сравнение с экспериментальными данными. Для монокристаллов такими данными могут служить макроскопические кривые нагружения и данные металлографических исследований. В качестве примера экспериментальные изображения боковых граней $(\bar{1}10)$ и (001) монокристалла при сжатии вдоль оси [110] до 6 % приведены на рис. 4. Интенсивность пластических деформаций косвенно может быть оценена по плотности наблюдаемых следов скольжения. Наиболее близкое качественное согласие расчетных и экспериментальных данных по распределению накопленных пластических деформаций наблюдалось для модели, учитывающей деформационное упрочнение и трение на поверхностях контакта с пуансонами (ср. рис. 4 и 2, *f*).



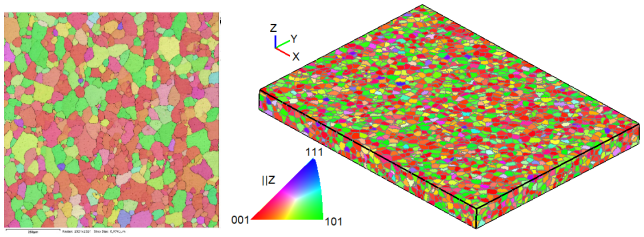
a *b* *c* *d*

Рис. 4. Деформационный рельеф, сформировавшийся на боковых гранях (001) (*a*, *c*) и $(\bar{1}10)$ (*b*, *d*) монокристалла алюминия при сжатии вдоль [110] до 6 % [33]

Fig. 4. Optical images of single crystal lateral faces coplanar with the (001) (*a*, *c*) and $(\bar{1}10)$ crystal planes (*b*, *d*) at 6 % compressive strain along the [110] [33]

2.3. Тестирование модели на мезо- и макроуровнях

Проиллюстрируем тестирование и верификацию поликристаллических моделей на мезо- и макроуровнях на примере расчетов для поликристаллов технически чистого алюминия. Наиболее полную информацию о характеристиках зеренной структуры, включая геометрические параметры и ориентацию зерен, обеспечивают данные EBSD-анализа. В качестве примера экспериментальная зеренная структура в цветах обратных полюсных фигур для направлений, перпендикулярных плоскости поверхности, приведена на рис. 5, *a*. Построенная на основе этих данных поликристаллическая модель размером 3×2,25×0,25 мм^3, содержащая 12000 зерен, приведена на рис. 5, *b*. В соответствии с экспериментальными данными модельная структура состоит из равноосных зерен, ориентации которых заданы набором углов Эйлера, полученных экспериментально.



a *b*

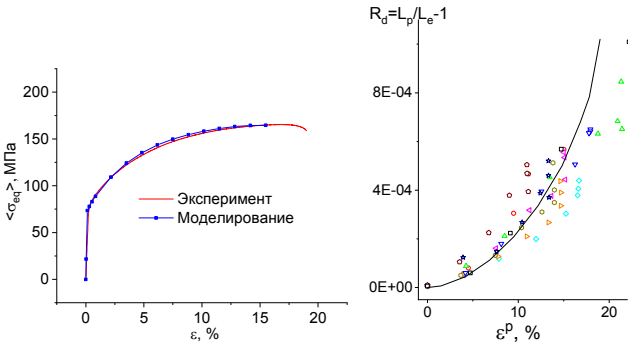
Рис. 5. Экспериментальная (*a*) и модельная (*b*) поликристаллические структуры технически чистого алюминия в цветах обратных полюсных фигур

Fig. 5. Experimental (*a*) and numerical polycrystalline structures (*b*) of commercially pure aluminum shown in inverse pole figure colors

Корректность поликристаллической модели должна быть подтверждена согласием расчетных и экспериментальных результатов на макро- и мезоуровнях. Хотя поведение всех зерен описывается одинаковыми определяющими соотношениями, кривые нагружения индивидуальных зерен будут зависеть от их кристаллографической ориентации относительно приложенной нагрузки. Определяющую роль в формировании деформационного отклика поликристаллов на мезо- и макроуровнях играют границы зерен [32; 35]. Характеристики НДС в расчетной области характеризуются существенной неоднородностью, т.е. напряжения и накопленные пластические деформации в каждом элементе демонстрируют отличные от других элементов значения НДС. Границы и тройные стыки зерен являются источниками концентрации напряжений и зарождения пластических сдвигов, о чем свидетельствуют многочисленные экспериментальные и численные исследования (например, [3; 7; 32; 35]).

Валидацией модели на макроуровне будет являться согласие кривых нагружения, полученных для экспериментальных образцов, и кривых нагружения модельных поликристаллов, полученных путем осреднения НДС по представительному мезообъему. Сравнение модельной и экспериментальной кривых нагружения для технически чистого алюминия (см. рис. 5) приведено на рис. 6, *a*. Для модельной структуры кривая нагружения была получена путем осреднения характеристик НДС по всем элементам расчетной области в соответствии с соотношениями (23)–(24). Согласие экспериментальной и расчетной кривых является верификацией модели на макроуровне.

Характеристиками, которые могут послужить подтверждением корректности модели на мезоуровне, являются картины локализации пластической деформации на поверхности модельных и экспериментальных поликристаллов. Экспериментально такие данные могут быть получены, например, методом корреляции цифровых изображений с высоким разрешением или методами сканирующей микроскопии. Уникальным материалом для верификации поликристаллических моделей на мезоуровне являются характеристики деформационного рельефа, образующегося на свободной поверхности в процессе пластического деформирования. Для определения деформации в плоскости нагружения необходимы данные о начальном и текущем местоположении точек поверхности, для чего требуется мониторинг смещений реперных точек в течении всего процесса деформирования. В отличие от этого, деформационный рельеф определяется по вертикальным смещениям, которые могут быть легко определены относительно изначально плоской поверхности. В работах [36; 37] на примере сплавов технически чистого алюминия и титана было показано, что деформационный рельеф на мезоуровне коррелирует со степенью пластической деформации в плоскости растяжения. Характеристики деформационного рельефа зависят от многих факторов, включая размер, форму, кристаллографическую ориентацию и механические свойства зерен, а также условия нагружения.



a *b*

Рис. 6. Экспериментальные и расчетные кривые нагружения технически чистого алюминия (*a*) и зависимость интенсивности деформационного рельефа R_d от деформации участков наблюдения (символы – экспериментальные данные для различных участков поверхности, сплошная линия – данные моделирования) (*b*)

Fig. 6. Experimental and numerical stress-strain curves of commercially pure aluminum (*a*) and dimensionless roughness parameter, R_d, plotted versus subsection strains (the symbols and solid line denote the experimental and numerical data for different surface subsections, respectively) (*b*)

На рис. 7 приведены картины деформационного рельефа, сформировавшегося на поверхности технически чистого алюминия в экспериментах на одноосное растяжение, и в модельной поликристаллической структуре. Качественный анализ показал, что в обоих случаях деформационный рельеф представляет собой совокупность складок разного масштаба. Микронеровности, образующие так называемый рельеф «апельсиновой корки» (англ. orange peel), связаны с экструзией и интрузией отдельных зерен относительно соседних областей. Более крупные складки формируются за счет коллективного смещения зеренных кластеров перпендикулярно поверхности и относятся к мезоуровню. На начальных этапах пластической деформации такие кластеры состоят из 2–3 зёрен и укрупняются до 10–15 зе-

рен с увеличением деформации. В течении всего процесса деформирования вплоть до образования шейки эти складки вносят наибольший вклад в деформационный рельеф. Анализ профилограмм поверхности экспериментальных и модельных образцов показал, что пики и впадины, сформировавшиеся на начальных этапах, изменяют амплитуду в процессе деформирования, но не меняют своего положения друг относительно друга (рис. 7, *b*, *c*).

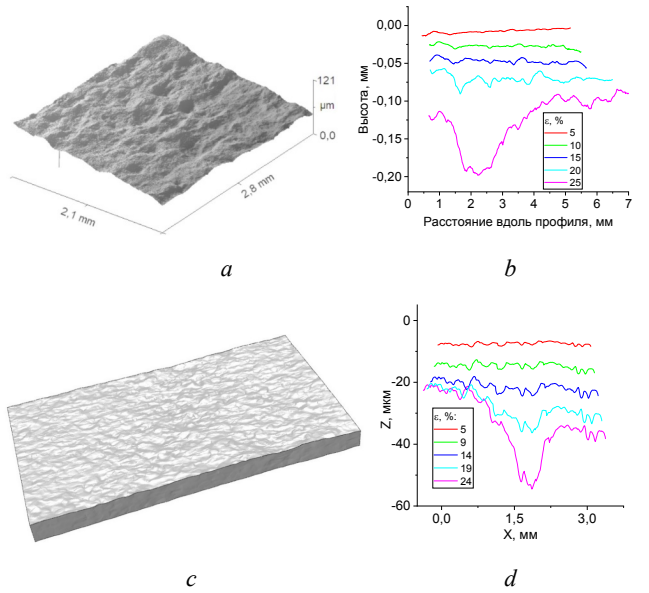


Рис. 7. Деформационный рельеф на поверхности экспериментального образца (*a*) и модельного поликристалла технически чистого алюминия (*c*) при ε = 0,19 и профилограммы, полученные экспериментально (*b*) и численно (*d*) при разных степенях деформации

Fig. 7. Deformation-induced surface roughness in the experimental (*a*) and model polycrystalline structures (*c*) of commercially pure aluminum at ε = 0.19 and corresponding surface profiles obtained experimentally (*b*) and numerically (*d*) at different tensile strains

В [36; 37] для количественной оценки рельефных образований в экспериментальных и модельных образцах был введен безразмерный параметр интенсивности деформационного рельефа, представляющий собой отношение длины профиля поверхности L_p к длине проекции профиля на плоскость L_e

$$R_d = L_p/L_e - 1. \quad (25)$$

Косвенно R_d связан со степенью неоднородности внутренней структуры. В идеальном однородном изотропном материале, где поверхность в процессе одноосного нагружения остается плоской, $R_d = 0$. Чем сильнее неоднородность структуры, тем более сложное НДС возникает в объеме материала, вызывая отклонение формы поверхности от плоскости, и тем выше значение R_d. Принципиальным отличием определения безразмерного параметра интенсивности деформационного рельефа R_d от традиционных методов оценки шероховатости является отсутствие фильтрации полученных профилограмм. В предположении, что деформационный рельеф является результатом многомасштабных процессов деформации, происходящих в нагруженном материала, анализ полученных профилей без фильтрации обеспечивает учет вкладов с разных масштабных уровней [36; 37].

Зависимости R_d от степени деформации участков наблюдения, полученные для образцов технически чистого алюминия экспериментально и численно приведены на рис. 6, *b* (разные символы соответствуют значениям, полученным для разных участков поверхности экспериментального образца). При умеренных степенях деформации наблюдалось хорошее согласие результатов моделирования с экспериментальными данными. Расхождение экспериментальных и численных значений R_d при развитых пластических деформациях связано с ограниченными размерами модели. В [38] было показано, что для численного воспроизведения деформационного рельефа на мезоуровне размер представительного объема будет определяться степенью деформации, приложенной к модели. Модель способна адекватно воспроизводить деформационное поведение материала на мезоуровне до тех пор, пока размер областей локализации пластической деформации не становится соизмеримым с размером модели.

2.4. Исследование сеточной сходимости

Необходимой процедурой при проведении численного анализа является исследование решения на сеточную сходимость. В классическом представлении эта процедура предполагает сравнение решений, полученных при аппроксимации одной и той же геометрической модели сетками с различным разрешением. Сходимость предполагает, что скорость сближения решений, полученных на разных сетках, нелинейно возрастает с уменьшением размера элементов. В случае структур, сгенерированных методом пошагового заполнения, такая процедура может быть проведена лишь косвенно, поскольку одна и та же поликристаллическая структура, сгенерированная на разных сетках, фактически имеет несколько отличающуюся геометрию элементов (зерен) и границ раздела (рис. 8). Хотя при сгущении сетки геометрическая форма структурных элементов стремится к предельному значению, границы раздела, полученные на разных сетках, в общем случае не совпадают, поэтому прямое сравнение полей напряжений и деформаций представляется сложно реализуемым. Тем не менее анализ сходимости решения краевой задачи упругопластического деформирования для таких структур может быть проведен качественно и количественно, аналогично анализу, проведенному в работах [39; 40] для поликристаллов, сгенерированных методом Вороного.

Проанализируем сеточную сходимость решения на примере сравнения пяти одинаковых поликристаллических моделей, содержащих 1000 зерен, сгенерированных методом пошагового заполнения на сетках 100×20×100, 125×25×125, 160×32×160, 200×40×200

и 250×50×250. На рис. 8 представлены модели, аппроксимированные самой грубой и самой мелкой из расчетных сеток. Сравнение всех структур показало, что сеточное разбиение обладает незначительным влиянием на получающуюся поликристаллическую структуру. Все структуры имели одинаковую геометрию и кристаллографическую ориентацию зерен.

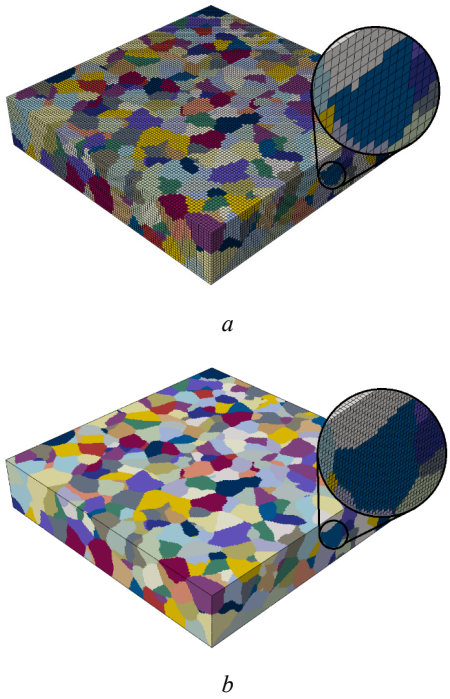


Рис. 8. Поликристаллические модели, построенные на сетках 100×20×100 (*a*) и 250×50×250 (*b*)

Fig. 8. Polycrystalline models generated on the 100×20×100 (*a*) and 250×50×250 meshes (*b*)

Полученные в результате расчетов компоненты тензоров напряжений и деформаций для разных разбиений сравнивались при одинаковых степенях растяжения. В качестве примера интенсивности пластических деформаций для трех выбранных структур приведены на рис. 9, *a*–*c*. Распределения напряжений и деформаций для моделей, построенных на разных сетках, незначительно отличались между собой, за исключением модели, построенной на самой грубой сетке (см. рис. 9, *a*).

Кривые нагружения моделей и частотные распределения интенсивности напряжений и пластических деформаций, полученные в расчетах на разных сетках приведены на рис. 9, *d*–*f*. Кривые нагружения, представляющие макроскопический осредненный отклик, демонстрируют быструю сходимость с увеличением разрешения сеток (см. рис. 9, *d*). Частотные кривые распределений интенсивности напряжений и пластических деформаций также сближаются, хотя и с меньшей скоростью (см. рис. 9, *e*, *f*). Следует отметить, что во многих работах отмечалось отсутствие сеточной сходимости решения в областях локализации пластической деформации: ширина полос локализации изменялась пропорционально изменению шага сетки [21; 41]. Наличие сходимости в представленных расчетах является следствием применения моделей ФТПК в комбинации с явным учетом границ зерен. Подобное заключение было сделано в работе [11].

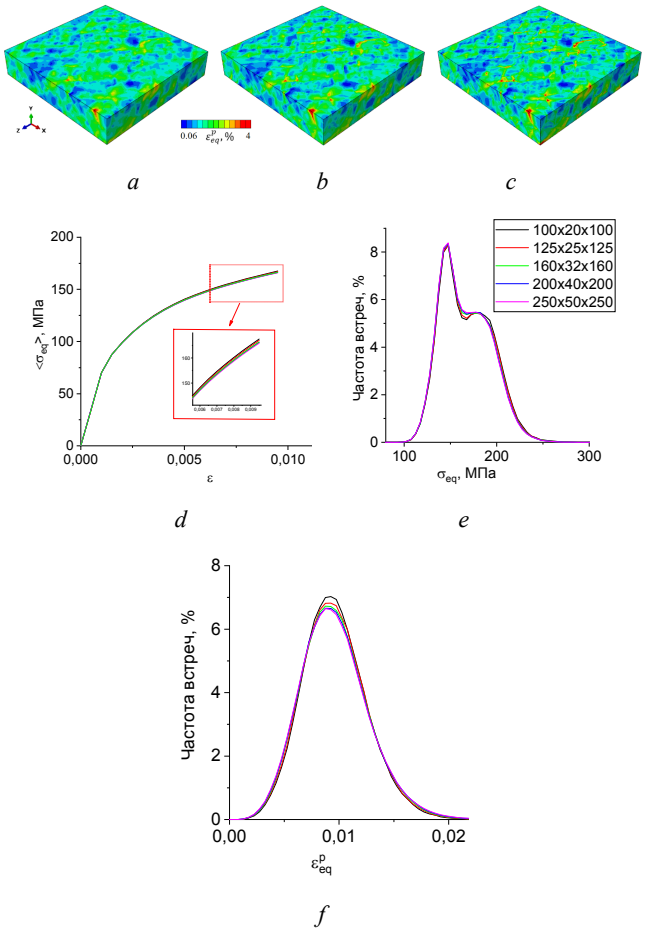


Рис. 9. Поля интенсивности пластических деформаций в поликристаллах, аппроксимированных сетками 100×20×100 (*a*), 160×32×160 (*b*) и 250×50×250 (*c*), кривые нагружения (*d*) и частотные распределения интенсивности напряжений (*e*) и пластических деформаций (*f*), полученные в расчетах на разных сетках

Fig. 9. Equivalent plastic strain fields in polycrystalline structures approximated with 100×20×100 (*a*), 160×32×160 (*b*) and 250×50×250 meshes (*c*), stress-strain curves (*d*) and frequency count distributions of equivalent stresses (*e*) and equivalent plastic strains (*f*) obtained with different meshes

Проведенные расчеты показали, что даже самая грубая из рассмотренных сеток позволяет качественно исследовать особенности НДС в поликристаллической структуре на мезоуровне.

2.5. Минимизация скоростной чувствительности

Статическая формулировка задачи подразумевает, что внешне приложенные силы уравновешиваются внутренними силами, вызванными напряжениями в материале. В случае вязкоупругого или вязкопластического материала напряжения зависят от скорости деформации. Тогда равновесие между приложенной нагрузкой

и откликом материала достигается за временной отрезок, который определяется скоростью нагружения и вязкими свойствами материала. В этом случае моделирование квазистатических процессов при искусственно завышенных скоростях деформации уже не является корректным. Поэтому важным условием применимости динамического подхода для моделирования квазистатических процессов является использование моделей материалов нечувствительных к скорости нагружения. В связи с этим параметры моделей ФТПК, которые в основном являются вязкопластическими, должны быть подобраны таким образом, чтобы исключить скоростную чувствительность.

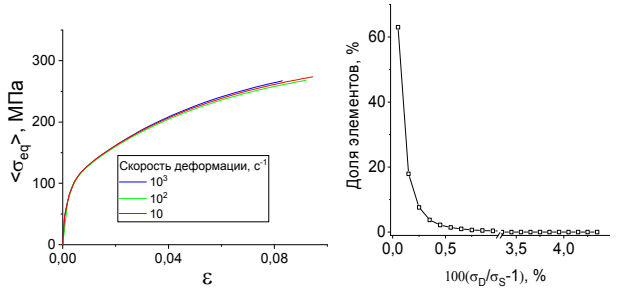
В [9; 28] было показано, что эффективно исключить скоростную чувствительность позволяет применение соотношения для расчета скорости пластических сдвигов на активных системах скольжения в виде зависимости от интенсивности скорости полной деформации в элементе $\dot{\varepsilon}_{eq}$:

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = k\dot{\varepsilon}_{eq}\frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau^{(\alpha)}_{CRSS}}, \qquad (26)$$

где k – константа, близкая к 1. Заметим, что в более строгой формулировке интенсивность скорости полной деформации должна быть заменена на деформацию, приведенную к системе скольжения аналогично напряжениям (12).

Для исследования чувствительности решения к скорости нагружения были проведены расчеты одноосного растяжения поликристаллической структуры при разных скоростях деформации. Получено, что использование соотношения (26) позволяет практически исключить скоростную чувствительность в диапазоне скоростей деформации до 10^3 с$^{-1}$. Отсутствие скоростной чувствительности на макроуровне подтверждается сравнением кривых нагружения, полученных при различных скоростях деформирования (рис. 10). Для рассмотренных скоростей кривые практически совпадают на начальном этапе деформирования. Слабое влияние скорости деформации проявляется при более высоких степенях деформации в расхождении кривых в пределах 1 %.

Следует отметить, что вязкопластические модели для скоростей пластических сдвигов в виде степенного закона (14) также обеспечивают эффективное снижение скоростной чувствительности на макроуровне при соответствующем выборе параметров $\dot{\gamma}_0$ и ν. Так, в [9] было показано, что при выборе значения $\dot{\gamma}_0$ на порядок выше средней скорости деформации и ν >5 кривые нагружения при ступенчатом изменении скорости нагружения от 10 до 10^4 с$^{-1}$ практически совпадали с квазистатической кривой. Вместе с тем распределения напряжений и деформаций на уровне зерен демонстрировали заметные различия. С увеличением скорости нагрузки области локализации пластической деформации становились шире, а значения деформаций в полосах сдвига уменьшалось. Это было связано с тем, что локальные скорости деформации в областях локализации могут быть на несколько порядков выше средней скорости деформации. В этом случае выбранные постоянные коэффициенты не в состоянии обеспечить достижения статического баланса между нагрузкой и реакцией материала.



a *b*

Рис. 10. Кривые квазистатического растяжения модельных поликристаллов, полученные в динамической постановке при искусственно завышенных скоростях деформации (*a*), и поэлементное сравнение эквивалентных напряжений σ_D и σ_S, полученных в статическом и динамическом расчетах (*b*)

Fig. 10. Quasistatic stress-strain curves of model polycrystals calculated using dynamic explicit with artificially high strain rates (*a*) and element-wise comparison of equivalent stresses σ_D and σ_S, obtained in static and dynamic calculations (*b*)

Соотношения вида (26) позволяют решить эту проблему, поскольку скорость пластических сдвигов становится автоматически выше в областях локализации деформации, где скорость полной деформации превышает средний уровень. Поэлементное сравнение между статическими и динамическими полями напряжений и деформаций показало совпадение в пределах 0,1 % для большей части элементов, при этом лишь единичные элементы вблизи границ раздела, демонстрировали расхождение в 3–5 % (рис. 10, *b*). Проведенный анализ показал эффективность использования зависимости (26) для минимизации скоростной чувствительности моделей ФТПК и, таким образом, их применимость при моделировании процессов квазистатического деформирования с искусственно завышенными скоростями нагружения.

Наконец, для обоснования эффективности использования динамических методов при решении задач квазистатики приведем сравнение вычислительных затрат, необходимых для решения одной и той же трехмерной задачи с использованием неявных и явных решателей. Максимальное количество элементов типа C3D8R [12], которые может вместить память одного и того же компьютера, при использовании явных схем в 10–12 раз превышало это значение для неявных решателей. При этом моделирование растяжения поликристалла, приведенного на рис. 8, *b*, до 8 % с использованием явных схем потребовало около 50 мин, а неявных – более 53 ч. Кроме того, эффективность использования явных схем кратно возрастает при параллельных вычислениях.

Заключение

Модели физической теории пластичности кристаллов в комбинации с явным учетом зеренной структуры являются эффективным инструментом для исследования деформационных процессов в поликристаллических материалах на разных масштабных уровнях. На микроуровне упругопластическая анизотропия, связанная с кристаллическим строением, учитывается через определяющие соотношения зерен. Описание напряженно-деформированного состояния на мезоуровне обеспечивается за счет явного введения геометрической модели зеренной структуры. Наконец эффективные свойства материала могут быть получены путем осреднения характеристик НДС по представительному мезообъему.

В настоящей работе рассмотрен подход к моделированию процессов квазистатического деформирования поликристаллов в рамках динамической постановки. Численное решение краевых задач с явным учетом морфологических особенностей микроструктуры требует значительных вычислительных ресурсов. Переход к явным схемам интегрирования по времени позволяет эффективно минимизировать вычислительные затраты, при этом обеспечивая квазистатическое решение с высокой степенью точности. При этом необходимыми условиями являются: 1) минимизации ускорения на этапе наращивания скорости нагружения, 2) применение моделей, нечувствительных к скорости деформации. В этом случае модели физической теории пластичности, большинство которых являются вязкопластическими, требуют специального рассмотрения.

В работе рассмотрены вычислительные аспекты, связанные с применением моделей физической теории пластичности для моделирования квазистатического нагружения поликристаллов. Приведены соотношения для описания скоростей пластических сдвигов на активных системах скольжения, позволяющие эффективно исключить скоростную чувствительность, что является необходимым условием моделирования при искусственно завышенных скоростях деформации. На примере расчетов для моно- и поликристаллов алюминия обсуждаются вопросы тестирования и верификации моделей на микро-мезо- и макроуровнях.

Библиографический список

1. Crystal plasticity finite element methods: in materials science and engineering / F. Roters [et al.]. – John Wiley & Sons, 2011. – 197 p.
2. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / D.D. Tjahjanto [et. al] // Acta Materialia. – 2009. – Vol. 58, № 4. – P. 1152–1211.
3. Трусов П.В., Волегов П.С., Кондратьев Н.С. Физические теории пластичности. – Пермь: Изд-во ПНИПУ, 2012. – 273 с.
4. Multilevel models in physical mesomechanics of metals and alloys: results and prospects / P.V. Trusov [et al.] // Phys. Mesomech. – 2021. – Vol. 24. – P. 391–417.
5. Gribov D.S., Trusov P.V. Three-level dislocation-based model for describing the deformation of polycrystals: structure, implementation algorithm, examples for studying nonproportional cyclic loading // Phys. Mesomech. – 2022. – Vol. 25. – P. 557–567. DOI: 10.1134/S102995992206008X
6. Computational crystal plasticity: from single crystal to homogenized polycrystals / G. Cailletaud [et al.] // Technische Mechanik. – 2003. – Vol. 1. – P. 130–145.
7. Three dimensional predictions of grain scale plasticity and grain boundaries using crystal plasticity finite element models / M. Knezevic [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2014. – Vol. 277. – P. 239–259. DOI: 10.1016/j.cma.2014.05.003
8. Ostapovich K.V., Trusov P.V., Yants A.Y. Prediction of crystallographic texture formation in polycrystalline samples under severe plastic deformation based on a two-level statistical elasto-viscoplastic model // Phys Mesomech. – 2021. – Vol. 24. – P. 225–236. DOI: 10.1134/S1029959921030012
9. Microstructure-based simulations of quasistatic deformation using an explicit dynamic approach / V. Romanova [et al.] // Facta Universitatis, series: Mechanical Engineering. – 2019. – Vol. 17. – P. 243–254.
10. On the Solution of Quasi-Static Micro- and Mesomechanical Problems in a Dynamic Formulation / V.A. Romanova [et al.] // Phys. Mesomech. – 2019. – Vol. 22. – P. 296–306.
11. Harewood F.J., McHugh P.E., Comparison of the implicit and explicit finite element methods using crystal plasticity // Comput Mater Sci. – 2007. – Vol. 39. – P. 481–494. DOI: 10.1016/j.commatsci.2006.08.002
12. Abaqus Analysis User's Guide. – Dassault Systemes, 2013.
13. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yanz A.Y. Motion decomposition, frame-indifferent derivatives, and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling // Phys. Mesomech. – 2017. – Vol. 20. – P. 357–376. DOI: 10.1134/S1029959917040014
14. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 3: теории упрочнения, градиентные теории // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – Т. 3. – С. 146–197.
15. Busso E.P., Cailletaud G. On the selection of active slip systems in crystal plasticity // Int. J. Plast. – 2005. – Vol. 21. – P. 2212–2231.
16. Taylor G.I. Plastic strain in metals // Journal of the Institute of Metals. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.
17. Bishop J.F.W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face centered metal // Phil. Mag. – 1951. – № 42. – P. 1298–1307.
18. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 1: жесткопластические и упругопластические модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – Т. 1. – С. 5–45.
19. Chaboche J.L. Time-independent constitutive theories for cyclic plasticity // Int J Plast. – 1986. – Vol. 2. – P. 149–188. DOI: 10.1016/0749-6419(86)90010-0

20. Трусов П.В., Волегов П.С. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч. 2: вязкопластические и упруговязкопластические модели // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2011. – Т. 2. – С. 101–131.

21. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids // Acta Metallurgica. – 1983. – No. 31. – P. 1951–1976.

22. Arsenlis A., Parks D.M. Modeling the evolution of crystallographic dislocation density in crystal plasticity // J. Mech. Phys. Solids. – 2002. – Vol. 50, no. 9. – P. 1979–2009.

23. Ma A., Roters F. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals // Acta Materialia. – 2004. – Vol. 52, no. 12. – P. 3603–3612.

24. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations // Acta Mater. – 2006. – Vol. 54. – P. 2169–2179.

25. Evers L.P., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Non-local crystal plasticity model with intrinsic SSD and GND effects // J. Mech. Phys. Solids. – 2004. – Vol. 52, no. 10. – P. 2379–2401.

26. Hollenstein M., Jabareen M., Rubin M.B. Modeling a smooth elastic–inelastic transition with a strongly objective numerical integrator needing no iteration // Comput Mech. – 2013. – Vol. 52. – P. 649–667. DOI: 10.1007/s00466-013-0838-7

27. Forest S., Rubin M.B. A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic–plastic transition and no slip indeterminacy // European J. Mech. – A Solids. – 2016. – Vol. 55. – P. 278–288. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2015.08.012

28. Crystal plasticity modeling of the cyclic behavior of polycrystalline aggregates under non-symmetric uniaxial loading: Global and local analyses / H. Farooq [et al.] // Int J Plast. – 2020. – Vol. 126. – P. 102619. DOI: 10.1016/j.ijplas.2019.10.007

29. Романова В.А., Балохонов Р.Р., Карпенко Н.И. Моделирование механического поведения материалов с учетом трехмерной внутренней структуры // Физ. мезомех. – 2004. – Т. 7. – С. 71–79.

30. Romanova V., Balokhonov R. A method of step-by-step packing and its application in generating 3D microstructures of polycrystalline and composite materials // Engineering with Computers. – 2021. – Vol. 37. – P. 241–250.

31. Mecking H., Kocks U.F. Kinetics of flow and strain-hardening // Acta Metallurgica. – 1981. – Vol. 29. – P. 1865–1875. DOI: 10.1016/0001-6160(81)90112-7

32. Armstrong R.W. Dislocation and Grain Size Roles in Physical Mesomechanics. // Phys. Mesomech. – 2021. – Vol. 24. – P. 418–425. DOI: 10.1134/S1029959921040068

33. Теплякова Л.А., Лычагин Д.В., Беспалова И.В. Закономерности макролокализации деформации в монокристаллах алюминия с ориентацией оси сжатия [110] // Физ. мезомех. – 2004. – Т. 7, № 6. – С. 63–78.

34. Mechanical Aspects of Nonhomogeneous Deformation of Aluminum Single Crystals under Compression along [100] and [110] Directions / V. Romanova [et al.] // Metals. – 2022. – Vol. 12. DOI: 10.3390/met12030397

35. Поверхностные слои и внутренние границы раздела в гетерогенных материалах под ред. В.Е. Панина. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2006.

36. Evolution of Mesoscopic Deformation-Induced Surface Roughness and Local Strains in Tensile Polycrystalline Aluminum / V.A. Romanova [et al.] // Phys. Mesomech. – 2021. – Vol. 24. – P. 570–577. DOI: 10.1134/S1029959921050088

37. Early Prediction of Macroscale Plastic Strain Localization in Titanium from Observation of Mesoscale Surface Roughening / V. Romanova [et al.] // Int J Mech Sci. – 2019. – Vol. 161–162. – P. 105047.

38. On the definition of RVE size in simulations of mesoscale deformation-induced surface roughening in polycrystals / R. Balokhonov, E. Emelianova, M. Pisarev, O. Zinovieva, V. Shakhidjanov // Procedia Structural Integrity. – 2021. DOI: 10.1016/j.prostr.2021.03.010

39. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries / O. Diard [et al.] // Int J Plast. – 2005. – Vol. 21. – P. 691–722.

40. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model / F. Barbe [et al.] // Int J Plast. – 2001. – Vol. 17. – P. 513–536.

41. Peirce D., Asaro R.J., Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals // Acta Metallurgica. – 1982. – No. 30. – P. 1087–1119.

References

1. Crystal plasticity finite element methods: in materials science and engineering / F. Roters [et al.] – John Wiley & Sons, 2011. – 197 p.

2. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / D. D. Tjahjanto [et. al] // Acta Materialia. – 2009. – Vol. 58, № 4. – P. 1152-1211.

3. Trusov P. V., Volegov P. S., Kondratev N. S. Fizicheskie teorii plastichnosti. Perm, Izd-vo PNIPU, 2012, 273 p.

4. Multilevel models in physical mesomechanics of metals and alloys: results and prospects / P. V. Trusov [et al.] // Phys. Mesomech. – 2021. – V. 24. – pp. 391–417.

5. Gribov D.S., Trusov P.V. Three-level dislocation-based model for describing the deformation of polycrystals: structure, implementation algorithm, examples for studying nonproportional cyclic loading. // Phys. Mesomech. – 2022. – V. 25. – pp. 557–567. doi: 10.1134/S102995992206008X.

6. Computational crystal plasticity: from single crystal to homogenized polycrystals / G. Cailletaud [et al.] // Technische Mechanik. – 2003. –V. 1. – pp. 130–145.

7. Three dimensional predictions of grain scale plasticity and grain boundaries using crystal plasticity finite element models/ M. Knezevic [et al.] // Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. – 2014. – V. 277. – pp. 239-259. doi: 10.1016/j.cma.2014.05.003.

8. Ostapovich K.V., Trusov P.V., Yants A.Y. Prediction of crystallographic texture formation in polycrystalline samples under severe plastic deformation based on a two-level statistical elasto-viscoplastic model. // Phys Mesomech. – 2021. – V.24. – pp.225–236. doi: 10.1134/S1029959921030012

9. Microstructure-based simulations of quasistatic deformation using an explicit dynamic approach / V. Romanova [et al.] // Facta Universitatis, series: Mechanical Engineering. – 2019. – V. 17. – pp. 243–254.

10. On the solution of quasi-static micro- and mesomechanical problems in a dynamic formulation./ V.A. Romanova [et al.] // Phys. Mesomech. – 2019. – V. 22. – pp. 296–306.

11. Harewood F.J., McHugh P.E., Comparison of the implicit and explicit finite element methods using crystal plasticity. //

Comput Mater Sci. – 2007. – V. 39. – pp.481–494. doi: 10.1016/j.commatsci.2006.08.002.

12. Abaqus Analysis User's Guide, Dassault Systemes, 2013

13. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yanz A.Y. Motion decomposition, frame-indifferent derivatives, and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling.// Phys. Mesomech. – 2017. – V. 20. – pp. 357–376. doi: 10.1134/S1029959917040014

14. Trusov P. V., Volegov P. S. Crystal plasticity theories and their applications to the description of inelastic deformations of materials. Part 3: hardening theories, gradient theories // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2011. – Vol. 3. – pp. 146-197.

15. Busso E. P., Cailletaud G. On the selection of active slip systems in crystal plasticity. // Int. J. Plast. – 2005. – V. 21. – pp. 2212–2231.

16. Taylor G. I. Plastic strain in metals // Journal of the Institute of Metals. – 1938. – Vol. 62. – pp. 307–324

17. Bishop J. F. W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face centered metal. // Phil. Mag. – 1951. – № 42. – pp. 1298–1307.

18. Trusov P. V., Volegov P. S. Crystal plasticity theories and their applications to the description of inelastic deformations of materials. Part 1: rigid-plastic and elastoplastic theories // PNRPU Mechanics Bulletin. – 2011. – Vol. 1. – pp. 5-45.

19. Chaboche J.L. Time-independent constitutive theories for cyclic plasticity. // Int J Plast. – 1986. – V. 2. – pp. 149-188. doi.org/10.1016/0749-6419(86)90010-0.

20. Trusov P. V., Volegov P. S. Crystal plasticity: Theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 2: Viscoplastic and elastoviscoplastic models// PNRPU Mechanics Bulletin. – 2011. – Vol. 2. – pp. 101-131.

21. Peirce D., Asaro R. J., Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. // Acta Metallurgica. – 1983. – № 31. – pp. 1951–1976.

22. Arsenlis A., Parks D. M. Modeling the evolution of crystallographic dislocation density in crystal plasticity. // J. Mech. Phys. Solids. – 2002. – V. 50, № 9. – pp. 1979–2009.

23. Ma A., Roters F. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals. // Acta Materialia. – 2004. – V. 52, № 12. – pp. 3603–3612.

24. Ma A., Roters F., Raabe D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations. // Acta Mater. – 2006. -V. 54. – pp. 2169–2179.

25. Evers L.P., Brekelmans W.A.M., Geers M.G.D. Non-local crystal plasticity model with intrinsic SSD and GND effects // J. Mech. Phys. Solids. – 2004. – V. 52, № 10. – pp. 2379–2401.

26. Hollenstein M., · Jabareen M., · Rubin M.B., Modeling a smooth elastic–inelastic transition with a strongly objective numerical integrator needing no iteration. // Comput Mech. – 2013. – V.52. – pp.649–667. doi: 10.1007/s00466-013-0838-7.

27. Forest S., Rubin M.B., A rate-independent crystal plasticity model with a smooth elastic–plastic transition and no slip indeterminacy. // European J. Mech. – A Solids. – 2016. –V.55. pp. 278-288, doi: 10.1016/j.euromechsol.2015.08.012.

28. Crystal plasticity modeling of the cyclic behavior of polycrystalline aggregates under non-symmetric uniaxial loading: Global and local analyses. /Farooq H [et al.] // Int J Plast. –2020. – V.126. – 102619. doi: 10.1016/j.ijplas.2019.10.007.

29. Romanova V.A., Balokhonov R.R., Karpenko N.I. Simulation of the mechanical behavior of materials with regard to the 3D internal structure // Phys. Mesomech. – 2004. – Vol. 7. – pp. 71-79.

30. Romanova V., Balokhonov R. A Method of step-by-step packing and its application in generating 3D microstructures of polycrystalline and composite materials. // Engineering with Computers. – 2021. – V. 37. – pp. 241–250.

31. Mecking H., Kocks U.F., Kinetics of flow and strain-hardening. // Acta Metallurgica. – 1981. – V.29. – pp.1865-1875. doi: 10.1016/0001-6160(81)90112-7.

32. Armstrong R.W. Dislocation and grain size roles in physical mesomechanics. // Phys. Mesomech. – 2021. – V. 24. – pp. 418–425. doi:10.1134/S1029959921040068.

33. Teplyakova L.A., Lychagin D.V., Bespalova I.V. Mechanisms of deformation macrolocalization in aluminium single crystals with loading axis orientation [110] // Phys. Mesomech. – 2004. – Vol. 7, is. 6. – pp. 63-78.

34. Mechanical aspects of nonhomogeneous deformation of aluminum single crystals under compression along [100] and [110] directions. / V. Romanova [et al.] // Metals. – 2022. – 12. doi: 10.3390/met12030397.

35. Poverhnostnye sloi i vnutrennie granicy razdela v geterogennyh materialah pod red. V.E.Panina. Novosibirsk: Izd-vo SO RAN, 2006.

36. Evolution of mesoscopic deformation-induced surface roughness and local strains in tensile polycrystalline aluminum / Romanova V. A. [et al.] // Phys. Mesomech. – 2021. – V. 24. – pp. 570-577. doi.org/10.1134/S1029959921050088

37. Early prediction of macroscale plastic strain localization in titanium from observation of mesoscale surface roughening / V. Romanova [et al.] // Int J Mech Sci. – 2019. – V. 161–162. – 105047.

38. Balokhonov R., Emelianova E., Pisarev M., Zinovieva O., Shakhidjanov V., On the definition of RVE size in simulations of mesoscale deformation-induced surface roughening in polycrystals. / V. Romanova [et. al] // Procedia Structural Integrity. – 2021. doi: 10.1016/j.prostr.2021.03.010

39. Evaluation of finite element based analysis of 3D multicrystalline aggregates plasticity. Application to crystal plasticity model identification and the study of stress and strain fields near grain boundaries / O. Diard [et al.] // Int J Plast. – 2005. – V. 21. – pp. 691–722.

40. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. Part 1: F.E. model / F. Barbe [et al.] // Int J Plast. – 2001. – V. 17. – pp. 513–536.

41. Peirce D., Asaro R. J., Needleman A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. // Acta Metallurgica. – 1982. – № 30. – pp. 1087–1119.

Финансирование. Обзор выполнен в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2021-0002. Результаты, приведенные в разделе 3, были получены в рамках проекта Российского научного фонда № 20-19-00600 (https://rscf.ru/project/20-19-00600/).

Конфликт интересов. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов равноценен.

Funding. The review was carried out within the framework of the state assignment for the Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, topic number FWRW-2021-0002. The results presented in section 3 were obtained within the project of the Russian Science Foundation (No. 20-19-00600) (https://rscf.ru/project/20-19-00600/).

Conflict of interest. The authors declare no conflict of interest.

The contribution of the authors is equivalent.