

Instytut Podstawowych Problemów Techniki
Polskiej Akademii Nauk



Rozprawa doktorska

**MODELOWANIE DEFORMACJI PLASTYCZNYCH
W KRYSZTAŁACH METALI METODĄ
PRZYROSTOWEJ MINIMALIZACJI ENERGII**

Mgr inż. Michał Kursa

Promotor rozprawy:
Prof. dr hab. Henryk Petryk

Warszawa
2010

Podziękowania

Niniejsza rozprawa doktorska zawiera wyniki badań prowadzonych podczas Studiów Doktoranckich w Instytucie Podstawowych Problemów Techniki PAN w Warszawie (IPPT).

Pragnę podziękować za wsparcie udzielone ze strony Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego w ramach grantu nr N N501 071935.

Pragnę również podziękować za wsparcie w ramach Sieci Doskonałości „knowledge-based multicomponent materials for durable and safe performance” (KMM-NoE).

Michał Kursa

Streszczenie

Rozprawa doktorska dotyczy modelowania właściwości krysztalów metali podlegających procesom dużych deformacji sprężysto-plastycznych. Sformułowanie modelu jest niezależne od skali czasu i jest rozwijane w ramach klasycznej teorii plastyczności krysztalów z wieloma systemami poślizgu. W celu przewyciężenia trudności związanych z niejednoznacznością odpowiedzi odkształcanego plastycznie krysztalu, zaproponowano podejście wykorzystujące wprost metodę minimalizacji przyrostu energii dostarczanej do krysztalu. Modelowany przebieg procesu jest wyznaczany krok po kroku dla skończonych przyrostów deformacji poprzez minimalizację energii przyrostowej drugiego rzędu. Wprowadzono nową koncepcję selektywnej symetryzacji związków konstytutywnych, która umożliwia stosowanie minimalizacji energii przyrostowej, również w modelowaniu formowania mikrostruktury w początkowo jednorodnym krysztale. Opracowane algorytmy obliczeniowe, bazujące na metodzie przyrostowej minimalizacji energii, sformułowano dla procesów sterowanych kinematycznie z pełnymi lub częściowymi więzami oraz dodatkowymi stopniami swobody w przypadku modelowania podziału ziarna. Obliczane w każdym przyrostowym kroku deformacji rozwiązanie określa przyrosty ścinania na aktywnych systemach poślizgu w krysztale oraz niewiadome składowe przyrostu deformacji. Przykłady obliczeniowe i porównania z obserwacjami eksperymentalnymi, zaczerpniętymi z literatury, dotyczą krysztalów o sieci regularnej ściennie centrowanej. Zamieszczone wyniki modelowania procesów prostego ścinania i jednoosiowego rozciągania dotyczą jednorodnych krysztalów. Próbę kanalikową i ściskanie w płaskim stanie odkształcenia modelowano z uwzględnieniem podziału krysztalu na warstwy, w których aktywna jest mniejsza liczba systemów poślizgu. Modelowanie właściwości polikrysztalu metodą uśredniania Taylora przeprowadzono w zakresie zarówno małych jak i dużych deformacji z wyznaczeniem rozwoju tekstury.

Spis treści

1	Wstęp	7
1.1	Cel i zakres pracy	7
1.2	Układ pracy	9
2	Model sprężysto-plastycznego kryształu	11
2.1	Plastyczne i sprężyste cechy kryształu	13
2.2	Model kinematyki deformacji w kryształach	18
2.3	Hipersprężysty model materiału w otoczeniu konfiguracji odciążonej	21
2.4	Przyrostowe moduły sprężystości	22
2.5	Związki konstytutywne modelu z wieloma systemami poślizgu	23
2.6	Przyrostowe związki konstytutywne wyrażone w miarach niesymetrycznych	27
2.7	Prawa wzmocnienia	28
2.8	Symetryzacja związków konstytutywnych - dotychczasowe podejścia	38
2.9	Związki konstytutywne w przypadku małych deformacji - teoria geometrycznie liniowa	39
3	Zagadnienie symetryzacji macierzy modułów interakcji	41
3.1	Selektywna symetryzacja macierzy modułów interakcji	41
3.2	Charakterystyka selektywnej symetryzacji i wpływu parametru r	45
3.3	Porównanie metod symetryzacji macierzy modułów interakcji	49
4	Przyrostowa minimalizacja energii w modelowaniu procesów deformacji	53
4.1	Opis termodynamiczny	54
4.1.1	Reprezentatywny element materiału	54
4.1.2	Złożony układ termodynamiczny	55
4.1.3	Moc odkształcenia i moc dyssypowana	57
4.1.4	Materiał z wieloma mechanizmami deformacji niesprężystej	58
4.2	Minimalizacja przyrostu energii układu	60
4.2.1	Warunki stabilności stanu równowagi układu	60
4.2.2	Minimum energii przyrostowej układu	61
4.2.3	Przybliżenie 2-go rzędu energii przyrostowej układu	62
4.2.4	Stacjonarność energii przyrostowej i ograniczenia konstytutywne	64
4.3	Zastosowanie do procesu deformacji kryształu	65
4.3.1	Zagadnienie deformacji kryształu	66
4.3.2	Minimalizacja energii 1-go rzędu	66
4.3.3	Minimalizacja energii 2-go rzędu	67

4.3.4	Kinematyczne sterowanie procesem deformacji - pełne i częściowe ograniczenia	69
4.4	Zastosowanie do modelowania formowania podstruktury w kryształach	70
4.4.1	Mikrostruktura w postaci różnie zdeformowanych pasm	71
4.4.2	Model podziału ziarna w postaci laminatu pierwszego rzędu	72
4.4.3	Zastosowanie przyrostowej minimalizacji energii w modelowaniu podziału ziarna	74
5	Algorytmy przyrostowej minimalizacji energii	75
5.1	Sformułowanie minimalizacji energii przyrostowej na skończonym kroku	76
5.2	Zastosowanie metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a	80
5.3	Algorytm minimalizacji w przypadku jednorodnej deformacji z pełnymi więzami kinematycznymi	81
5.3.1	Skończone deformacje – algorytm lagrange'owski	83
5.3.2	Alternatywny algorytm eulerowski	91
5.3.3	Małe odkształcenia – bez uwzględnienia obrotów sieci	101
5.4	Algorytm minimalizacji w przypadku deformacji z kinematycznymi stopniami swobody	107
5.5	Algorytm minimalizacji w przypadku niejednorodnej deformacji	110
6	Wyniki modelowania procesów deformacji kryształów	115
6.1	Modelowanie deformacji bez uwzględnienia podziału ziarna	115
6.1.1	Pełna kontrola kinematyczna. Proste ścinanie	115
6.1.2	Analiza przejścia między narożami powierzchni plastyczności	122
6.1.3	Częściowa kontrola kinematyczna. Jednoosiowe rozciąganie monokryształu	126
6.1.4	Jednoosiowe rozciąganie monokryształu - porównanie z eksperymentem	129
6.1.5	Obciążanie w kierunkach o wysokiej symetrii	136
6.2	Modelowanie deformacji z uwzględnieniem podziału na podziarna	141
6.2.1	Pełna kontrola kinematyczna. Porównanie wyników numerycznej symulacji z podziałem i bez podziału ziarna	141
6.2.2	Częściowa kontrola kinematyczna. Próba kanalikowa i ściskanie w p.s.o.	143
7	Zastosowanie do modelowania polikryształów metali	151
7.1	Schemat obliczeniowy dla polikryształu	151
7.2	Wyniki numerycznej symulacji w zakresie małych odkształceń	153
7.2.1	Jednoosiowe rozciąganie polikryształu	154
7.2.2	Powierzchnie plastyczności polikryształu	154
7.3	Wyniki numerycznej symulacji w zakresie dużych deformacji – rozwój tekstury	155
8	Podsumowanie i wnioski końcowe	159
	Bibliografia	163

Rozdział 1

Wstęp

1.1 Cel i zakres pracy

Model materiału

Niniejsza rozprawa dotyczy modelowania procesów dużych deformacji kryształów metali, które ulegają plastycznemu odkształceniu wskutek uruchamiania wielu wewnętrznych mechanizmów dyslokacyjnych. Zjawisko plastycznego odkształcania jest interpretowane jako wynik prostego ścinania generowanego ruchem dyslokacji na krystalograficznych systemach poślizgu. Inne mechanizmy deformacji kryształów np. poprzez bliźniakowanie nie są przedmiotem badań w niniejszej rozprawie. W klasycznym modelu sprężysto-plastycznej deformacji kryształów metali, w każdej chwili procesu deformacji niewiadomymi są prędkości ścinania na poszczególnych systemach tworzących poszukiwany zbiór aktywnych systemów poślizgu. Mimo że model kryształu jest dobrze znany w literaturze, to konieczność uwzględnienia złożonego charakteru wzajemnego oddziaływania mechanizmów dyslokacyjnych znacznie utrudnia wyznaczenie rozwiązania w ogólnym przypadku. Symulacje wykorzystujące taki model dobrze odzwierciedlają wyniki niektórych badań eksperymentalnych, np. testu jednoosiowego rozciągania. Odwołania do literatury dotyczącej natury fizycznej zagadnienia oraz metod modelowania zamieszczono w rozdziale 2.

W rozprawie rozpatrywane są procesy dużych deformacji kryształów, wywołane zewnętrznymi wymuszeniami wolno zmieniającymi się w czasie. Modelowanie procesów deformacji odbywa się przy założeniu stałej temperatury, z pominięciem efektów dynamicznych oraz lepkich. Przebieg procesu deformacji jest rozpatrywany jako niezależny od skali czasu, a więc niezależny od prędkości obciążania. W niezależnym od skali czasu sformułowaniu trudność dotyczy wyznaczania, które z możliwych mechanizmów zostaną uruchomione oraz które z nich mogą następnie zostać zatrzymane. W tak sformułowanych zadaniach pojawia się niejednoznaczność wyboru aktywnych mechanizmów poślizgu pojedynczego kryształu. Trudność w wyborze włączających się mechanizmów może pojawiać się w dowolnej chwili procesu deformacji, a przypadkowy dobór może powodować uzyskanie rozwiązania niemającego sensu fizycznego, względnie wykazującego niepożądane niestabilności numeryczne. W modelowaniu procesów w zakresie deformacji skończonych należy uwzględnić efekty wynikające z obrotów sieci kryształów, prowadzące do geometrycznego wzmocnienia bądź osłabienia materiału w trakcie deformacji.

Trudności związane z niejednoznacznością odpowiedzi materiału można ominąć po-

przez uwzględnienie członów lepkich, co jest niezbędne przy nierozpatrywanych tu obciążeniach dynamicznych, lecz często stosowane także przy powolnych deformacjach. Założenie, że kryształ jest początkowo makroskopowo idealnie jednorodny, powoduje wówczas innego rodzaju trudności, np. w modelowaniu obserwowanego doświadczalnie podziału pojedynczego kryształu, stanowiącego ziarno w agregacie polikrystalicznym, na szereg pasm deformacji, w których aktywne są różne systemy dyslokacyjnego poślizgu na płaszczyznach krystalograficznych. Z kolei, założenie początkowo niejednorodnego kryształu prowadzi do rozwiązań silnie zależnych od arbitralnie przyjętych imperfekcji początkowych, co w przypadku dużych deformacji nie ma wystarczającego uzasadnienia fizycznego. Podobne problemy występują gdy kryształ jest obciążany wzdłuż osi wielokrotnej symetrii. Zakres rozprawy obejmuje zbadanie wyżej wymienionych zagadnień, co motywowało zastosowanie bardziej do tego celu adekwatnego, choć trudniejszego do implementacji komputerowej, modelu plastyczności niezależnego od skali czasu.

Metoda przyrostowej minimalizacji energii

Dotychczas stosowane metody nie pokonały w sposób zadowalający trudności związanych z niejednoznacznością odpowiedzi odkształcanego plastycznie kryształu. W niniejszej rozprawie przedstawiono inne podejście, wykorzystujące metodę przyrostowej minimalizacji energii dostarczanej do układu w zastosowaniu do modelowania procesów sprężysto-plastycznej deformacji materiałów z wieloma mechanizmami plastycznego płynięcia. Metoda minimalizacji energii bazuje na energetycznym kryterium stabilności ścieżki deformacji. Minimalizowane przyrosty energii obejmują człony zarówno pierwszego jak i drugiego rzędu względem przyrostu czasu. Kluczowe jest założenie, że ścieżka deformacji stabilnej odpowiada minimalizacji przyrostu energii, wykonywanej krok po kroku przy częściowych lub pełnych więzach kinematycznych. Zastosowanie metody przyrostowej minimalizacji energii umożliwia wyznaczanie niezerowych przyrostów ścinania, a tym samym określanie zbioru aktywnych systemów poślizgu.

Stosowanie metody minimalizacji energii przyrostowej wymaga nałożenia pewnych ograniczeń na prawa konstytutywne, mianowicie wymogu symetrii macierzy układu równań. Proponowana w rozprawie oryginalna metoda selektywnej symetryzacji dotyczy podstawowej macierzy zawierającej moduły interakcji aktywnych systemów poślizgu plastycznego. Metoda symetryzacji wpływa bezpośrednio na charakter wzmocnienia i w efekcie na odpowiedź materiału w procesie deformacji. W rozprawie pokazano, jak istotny jest wpływ przyjętej metody symetryzacji na otrzymywane rozwiązania. Z przeprowadzonych symulacji wynika, że znane z literatury inne metody symetryzacji dają błędne rozwiązania, co jest widoczne w zakresie dużych deformacji, gdy obrót sieci kryształu nie może być pominięty.

Cel rozprawy

Celem rozprawy jest opracowanie nowego podejścia i algorytmów komputerowych do symulacji numerycznych plastycznego płynięcia kryształów metali w zakresie dowolnie dużych deformacji, przy adaptacji metody przyrostowej minimalizacji energii do skończonej długości kroku całkowania po czasie.

Pasma deformacji

W trakcie procesów deformacji kryształów często obserwowane jest powstawanie pasm

deformacji. Można zaobserwować, że w początkowo jednorodnej próbce materiału, np. podczas próby kanalikowej, pojawiają się obszary o różnym charakterze deformacji. W modelowaniu z uwzględnieniem możliwości podziału kryształu, energetycznie preferowany typ deformacji w kryształach może stać się nierównomierny. W materiale tworzą się pasma deformacji prowadzące do powstawania podstruktur (mikrostruktur) ze ściankami dyslokacyjnymi na granicach pasm. W części rozprawy poświęconej formowaniu podstruktury jest pokazane, że metoda minimalizacji energii przyrostowej umożliwia wyznaczenie orientacji i chwili powstawania pasm deformacji. Wykonano modelowanie formowania mikrostruktury rozumianego jako podział kryształu (lub ziarna, w równoważnej terminologii) w formie laminatu pierwszego rzędu.

Algorytmy

Przedstawiona w rozprawie metoda symulacji procesów deformacji polega na wyznaczeniu odpowiedzi materiału w kolejnych punktach ścieżki deformacji wynikających z przyjętej długości kroku obciążania. Metoda obliczeniowa obejmuje przyrostową minimalizację energii dla skończonej długości kroku obciążania. Procedura minimalizacji wykonywana jest jednocześnie względem przyrostów ścinania na możliwych systemach poślizgu i względem wybranych składowych gradientu deformacji, tych które nie są ograniczone więzami. W przypadku symulacji możliwego podziału ziarna, do procedury minimalizacji wprowadzane są dodatkowe stopnie swobody (niewiadome) określające możliwy schemat podziału. W procedurze minimalizacji wykorzystywana jest metoda rozszerzonych mnożników Lagrange'a. Opracowany algorytm numerycznego całkowania związków konstytutywnych dla skończonego kroku obciążania zaimplementowano w programie Mathematica, gdzie m.in. obliczane są poszukiwane przyrosty ścinania oraz zbiór aktywnych systemów.

Wyniki

Wprowadzenie do algorytmów obliczeniowych częściowych więzów kinematycznych pozwala na symulację testów doświadczalnych. Rozprawa zawiera wyniki symulacji testów takich jak jednoosiowe rozciąganie monokryształów, próba kanalikowa i ściskanie w płaskim stanie odkształcenia. Przedstawione w rozprawie porównania wyników symulacji numerycznych i testów zaczerpniętych z literatury potwierdzają poprawność proponowanej metody analizy deformacji plastycznych w kryształach metali. Porównano wyniki jednoosiowego rozciągania monokryształów miedzi i aluminium w kierunkach o wysokiej symetrii. Porównano z testami doświadczalnymi numeryczne wyniki modelowania próby kanalikowej oraz ściskania w płaskim stanie odkształcenia, z uwzględnieniem możliwości podziału ziarna.

1.2 Układ pracy

Rozdział 2 zawiera przegląd literatury i opis istniejących modeli sprężysto-plastycznej deformacji kryształów metali niezależnych od skali czasu. Sprężystą odpowiedź materiału opisuje hipersprężysty związek konstytutywny sformułowany w konfiguracji odciążonej. Przedstawione związki konstytutywne, wyrażone również w miarach niesymetrycznych, uwzględniają wiele mechanizmów plastycznego płynięcia. Przedstawiono

znane z literatury prawa wzmocnienia, które określają przebieg samoumocnienia systemów poślizgu i umocnienia utajonego w plastycznie odkształcanych kryształach, a także znane dotychczas metody symetryzacji związków konstytutywnych.

W rozdziale 3 przedstawiono koncepcję symetryzacji macierzy modułów interakcji systemów poślizgu plastycznego w kryształach. Oryginalna koncepcja polega na selektywnej symetryzacji związków konstytutywnych, czyli z ograniczeniem do członów odpowiadających systemom aktywnym. Symetryzacja umożliwia późniejsze stosowanie metody przyrostowej minimalizacji energii. Wyniki modelowania uzyskane z wykorzystaniem proponowanej metody selektywnej porównano ze znanymi metodami symetryzacji.

W rozdziale 4 omówiono przyrostową minimalizację energii jako metodę rozwiązywania procesów deformacji niesprężystych. Sformułowanie metody jest tu na poziomie reprezentatywnego elementu materiału, który znajduje się w złożonym układzie termodynamicznym. Zdefiniowano energię przyrostową układu dla procesów quasi-statycznych i o stałej temperaturze. Sformulowano metodę przyrostowej minimalizacji energii przy sterowaniu kinematycznym, gdzie poszukiwane mogą być przyrosty ścinania, przyrosty gradientu deformacji przy częściowych więzach kinematycznych oraz niewiadome określające dodatkowe stopnie swobody w modelowaniu podziału ziarna. Metodę przyrostowej minimalizacji energii zastosowano w modelowaniu formowania mikrostruktury poprzez podział początkowo jednorodnego ziarna. Model podziału jest w postaci laminatu pierwszego rzędu.

W rozdziale 5 przedstawiono opracowane algorytmy przyrostowej minimalizacji energii. Numeryczne całkowanie odbywa się z zastosowaniem niejawnego schematu Eulera. W celu efektywnego poszukiwania minimum energii przyrostowej zastosowano metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a. Sformulowano algorytmy modelowania procesu deformacji, przy sterowaniu kinematycznym z pełnymi lub częściowymi więzami oraz z dodatkowymi stopniami swobody zgodnymi z przyjętym schematem laminatu pierwszego rzędu. W celu porównania przedstawiono alternatywny obiektywny algorytm Eulerowski oraz algorytm dla zakresu małych odkształceń i bez modelowania obrotów sieci. W algorytmie numerycznego całkowania równania dla plastycznej deformacji została użyta funkcja eksponencjalna argumentu tensorowego.

Rozdział 6 zawiera wyniki modelowania procesów deformacji kryształów. Działanie metody jest przedstawione na przykładzie modelowania prostego ścinania kryształu o wybranych orientacjach sieci krystalograficznej. Przeanalizowano nieregularności widoczne na krzywych obrazujących zmiany naprężenia, związane z przejściami między narożami powierzchni plastyczności. Przykłady obliczeniowe i porównania z eksperymentem dotyczą kryształów o sieci regularnie ściennie centrowanej. Wyniki modelowania jednoosiowego rozciągania porównano z dostępnymi wynikami eksperymentalnymi pochodzącymi literatury, także gdy kryształ jest obciążany w kierunku o wysokiej symetrii. Zamieszczono porównania wyników modelowania z obserwacjami eksperymentalnymi próby kanalikowej oraz ściskania w płaskim stanie odkształcenia. Obydwa procesy modelowano z możliwością podziału ziarna.

W rozdziale 7 przedstawiono rezultaty zastosowania opracowanego algorytmu do modelowania polikryształów metali, przy użyciu schematu uśredniania Taylora. Modelowanie procesów deformacji polikryształów dotyczy zakresu małych oraz dużych deformacji wraz z odtworzeniem rozwoju tekstury.

Rozdział 2

Model sprężysto-plastycznego krysztalu

Podstawy fizyczne

Podstawy fizyczne plastycznych deformacji krysztalów metali opisane są w wielu monografiach (Read, 1953), (Cottrell, 1953), (Öding, 1961), (Hull & Bacon, 2001). Dlatego też poniższy opis ma charakter jedynie krótkiego wprowadzenia w tematykę plastycznych deformacji krysztalów metali.

Metale w swej najczęściej spotykanej formie to polikrystaliczne agregaty złożone z dużej liczby ziaren o strukturze prostych krysztalów. Pojedynczy kryształ ma postać trójwymiarowego układu atomów, które tworzą regularną sieć punktową. Natomiast atomy to cząstki oscylujące wokół ustalonych punktów sieci, utrzymywane w przybliżeniu w jednym położeniu na skutek sił oddziaływania sąsiednich cząstek. Najczęściej występujące układy sieci metali to heksagonalny (ang. hcp), regularnie ściennie centrowany (w skrócie r.s.c. lub ang. fcc) i regularnie przestrzennie centrowany (w skrócie r.p.c. lub ang. bcc).

Obserwacje eksperymentalne krysztalów metali ujawniają, że ich plastyczna deformacja zachodzi głównie poprzez proste ścinanie w wyniku poślizgu na płaszczyznach, spowodowane działaniem naprężeń ścinających (innym mechanizmem plastycznych deformacji krysztalów jest bliźniakowanie, w niniejszej pracy nie rozpatrywane). Poślizg jest anizotropowy i zachodzi na wybranych, z pośród wielu możliwych, rodzinach płaszczyzn krystalograficznych, w pewnych krystalograficznych kierunkach leżących na tych płaszczyznach. W procesach deformacji poprzez poślizg, przebiegających w niskich temperaturach, preferowane są te z pośród wielu płaszczyzn i kierunków krystalograficznych, gdzie atomy mają najgęstsze wypełnienie. Takie najgęstsze ułożenie zmniejsza odległości między cząstkami, co prowadzi do spadku barier międzyatomowych, stąd opór przed poślizgiem jest mniejszy w płaszczyznach gęsto wypełnionych atomami. Wybrana para w postaci płaszczyzny poślizgu i kierunku poślizgu nazywana jest systemem poślizgu plastycznego. Plastyczne odkształcenia są łatwiejsze w krysztalach o większej liczbie systemów poślizgu oraz w przypadku, gdy te są korzystniej zorientowane względem kierunku działania obciążenia.

Wyniki wielu doświadczalnych eksperymentów potwierdzają tzw. prawo Schmid'a (1924), które określa, kiedy i na którym z systemów wystąpi plastyczny poślizg. Zgodnie z tym prawem, poślizg na wybranej płaszczyźnie i kierunku ma miejsce, gdy naprężenie

nie ścinające, działające wzdłuż tej płaszczyzny i kierunku osiągnie wartość krytyczną, niezależnie od innych składowych naprężenia zrzutowanych na sieć kryształu. Kluczowe składowe naprężenia napędzające poślizg są wyznaczone jako naprężenie zrzutowane na płaszczyznę i w kierunku poślizgu i nazywane wypadkowym naprężeniem ścinającym.

Plastyczna deformacja poprzez poślizg w kryształach zachodzi na skutek ruchu dyslokacji. Powszechnie stosowane pojęcie dyslokacji, zaproponowane jednocześnie i niezależnie przez G. I. Taylora, E. Orowana, M. Polanyi w roku 1934, zakłada ścięcie niejednorodne, które postępuje w płaszczyźnie poślizgu na skutek stopniowego przemieszczania się dyslokacji.

Rzeczywiste kryształy metali prawie nigdy nie tworzą idealnych sieci zawierających jeden typ atomów, przeciwnie, zawierają wiele różnego rodzaju imperfekcji sieci. Ze względu na geometryczny charakter, wyróżnia się defekty punktowe takie jak atomy domieszek lub wakanse oraz powierzchniowe w postaci granic ziaren lub ścianek dyslokacyjnych. Dyslokacje, interpretowane jako nośniki poślizgu w kryształach, są defektami liniowymi. W istocie, te defekty są decydującym czynnikiem wpływającym na plastyczność kryształów. Poślizg zaczyna się w jednym lub w kilku miejscach na płaszczyźnie poślizgu, od strukturalnych nieregularności kryształu i rozprzestrzenia się w płaszczyźnie poślizgu ze skończoną, na ogół nierównomierną prędkością. Natomiast struktura kryształu, podczas plastycznej deformacji na skutek poślizgów, pozostaje ciągle krystalograficzna.

Charakter dyslokacji jest określany przy użyciu wektora Burgersa \mathbf{b} , który wyznacza wielkość i kierunek przemieszczania się atomów w trakcie ruchu dyslokacji, jego długość $b = |\mathbf{b}|$ równa jest najmniejszej odległości międzyatomowej mierzonej na kierunku poślizgu. Wielkość poślizgu plastycznego można powiązać z gęstością poruszających się dyslokacji ρ . Prędkość ścinania $\dot{\gamma}$ (plastycznych odkształceń), dla grupy dyslokacji z identycznym wektorem Burgersa biegnących w rodzinie równoległych płaszczyzn poślizgu, jest wyznaczana jako iloczyn $\dot{\gamma} = b\rho\bar{v}$ zależny od średniej prędkości dyslokacji \bar{v} . Naprężenie ścinające τ , działające na płaszczyźnie poślizgu i w kierunku wektora Burgersa, wywołuje siłę działającą na dyslokację. Kryształ zacznie odkształcać się plastycznie wówczas, gdy siła działająca na dyslokację przekroczy progową wartość wynikającą z oporu ruchu dyslokacji.

Powstawanie dużych odkształceń plastycznych spowodowanych poślizgiem wymusza konieczność pojawienia się dużej liczby dyslokacji na względnie małej liczbie płaszczyzn poślizgu, co ma dodatkowo uzasadnić, obserwowane na powierzchni próbki, pasma poślizgu. Jednym z mechanizmów generującym dużą liczbę segmentów (pętli) dyslokacji (najczęściej krawędziowych, zakotwiczonych na dwóch punktach płaszczyzny poślizgu) są źródła Franka-Reada.

Granica plastyczności to krytyczna wartość ścinającego naprężenia (wynikająca z przyłożonego obciążenia) konieczna do zapewnienia dyslokacji odpowiedniej energii do przewyciężenia sił krótkiego zasięgu wywoływanych przez przeszkody oraz sił długiego zasięgu wynikających z istnienia innych dyslokacji. Wyznaczane eksperymentalnie wartości krytycznego naprężenia ścinającego zależą od rodzaju i ilości domieszek w kryształach, temperatury i szybkości odkształcania, a także gęstości ułożenia atomów w płaszczyźnie poślizgu (Cottrell, 1953). W miarę narastania plastycznej deformacji zwiększają się opory ruchu dyslokacji, co przekłada się na wzmocnienie materiału. W ruchu dyslokacji są obecne przeszkody, mogą to być defekty punktowe w postaci rozproszonych

atomów domieszek, powierzchniowe bariery takie jak granice międzyziarnowe oraz inne, przecinające się z tą ruchomą, dyslokacje (nazywane lasem dyslokacji). Dyslokacja unieruchomiona na barierze powoduje, że kolejne pochodzące z jednego źródła gromadzą się i są zatrzymywane na skutek odpychających sił ich wzajemnego oddziaływania. Te zjawiska przekładają się na wzrost wartości krytycznego naprężenia ścinającego i są określane jako wzmocnienie odkształceniowe. Zjawisko wzmocnienia można wyjaśnić, odwołując się do pola naprężenia wywołanego dyslokacjami, które działa hamująco na inne dyslokacje. W miarę jak postępuje plastyczna deformacja, dyslokacje są pomnażane, a następnie stopniowo unieruchamiane. Ruch dyslokacji jest stopniowo utrudniany i coraz większe naprężenie jest konieczne do produkcji dodatkowego plastycznego odkształcenia. W trakcie deformacji zjawisko wzmocnienia ma zmienny charakter. W początkowym zakresie łatwego poślizgu aktywne są tylko najbardziej uprzywilejowane systemy, więc hamujące naprężenie jest spowodowane wzajemnym oddziaływaniem dyslokacji na równoległych płaszczyznach oraz mechanizmem ich unieruchomienia i spiętrzania (ang. pile-up). Wówczas, na eksperymentalnych krzywych naprężenia obserwowane jest niewielkie wzmocnienie. Następnie w drugim etapie deformacji, systemy dodatkowe są aktywowane i dominujące staje się wzajemne blokowanie ruchu przecinających się dyslokacji, powodując dużo większe wzmocnienie (zakres silnego liniowego wzmocnienia). W trzecim etapie deformacji pojawia się poślizg poprzeczny dyslokacji śrubowych, więc stopniowo zmniejsza się stopień wzmocnienia (zakres parabolicznego wzmocnienia).

Poślizg na pojedynczym systemie poślizgu powoduje wzmocnienie systemu aktywnego oraz pozostałych nieaktywnych systemów poślizgu, (Taylor & Elam, 1923, 1925). Efekt (większego) wzmocnienia pozostałych również nieaktywnych systemów jest nazywany wzmocnieniem utajonym.

Plastyczna deformacja polikryształów zależy od indywidualnej orientacji poszczególnych kryształów, gdzie wypadkowe naprężenie ścinające zmienia się między kryształami. Obecność granic międzyziarnowych narusza ciągłość płaszczyzn oraz kierunków poślizgu i jest silną barierą w ruchu dyslokacji, które spiętrzają się na granicach. Wartość granicy plastyczności polikryształu w ogólności maleje wraz z rozmiarem ziaren, tę zależność opisuje klasyczny związek Halla-Petcha.

2.1 Plastyczne i sprężyste cechy kryształu

Systemy poślizgu w kryształach typu r.s.c.

Pojedynczy system poślizgu (\mathbf{n} , \mathbf{m}) to uporządkowana para utworzona z wektora \mathbf{n} wyznaczającego płaszczyznę, na której zachodzi poślizg plastyczny, oraz wektora \mathbf{m} , który wyznacza kierunek poślizgu i leży w płaszczyźnie poślizgu \mathbf{n} . Gdy znana jest sieć krystalograficzna metalu to można ustalić liczbę n_s systemów, na których możliwy jest poślizg. System poślizgu (\mathbf{n} , \mathbf{m}) jest trwale związany z siecią krystalograficzną metalu.

W niniejszej rozprawie wykorzystano standardowe oznaczenia stosowane w krystalografii do opisu kierunków i płaszczyzn, por. (Przybyłowicz, 1999). Wskaźniki prostej sieciowej u, v, w przedstawione w postaci $[uvw]$ oznaczają jeden kierunek lub kierunki równoległe, natomiast $\langle uvw \rangle$ to rodzina nierównoległych kierunków równoważnych krystalograficznie, ze względu na symetrię sieci. Wskaźniki płaszczyzny h, k, l przedstawione w postaci (hkl) oznaczają jedną płaszczyznę (płaszczyzny równoległe), natomiast $\{hkl\}$

to zbiór płaszczyzn nierównoległych, ale równoważnych krystalograficznie.

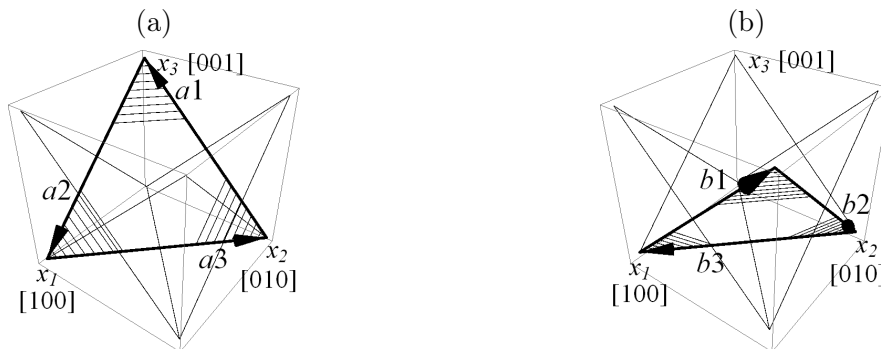
Tablica 2.1: Oznaczenia dodatnich systemów poślizgu w sieci typu r.s.c., wg pracy (Taylor, 1938b).

$a1 = (111)[0\bar{1}1]$	$b1 = (\bar{1}\bar{1}1)[011]$	$c1 = (\bar{1}11)[0\bar{1}1]$	$d1 = (1\bar{1}1)[011]$
$a2 = (111)[10\bar{1}]$	$b2 = (\bar{1}\bar{1}1)[\bar{1}0\bar{1}]$	$c2 = (\bar{1}11)[\bar{1}0\bar{1}]$	$d2 = (1\bar{1}1)[10\bar{1}]$
$a3 = (111)[\bar{1}10]$	$b3 = (\bar{1}\bar{1}1)[1\bar{1}0]$	$c3 = (\bar{1}11)[110]$	$d3 = (1\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}0]$

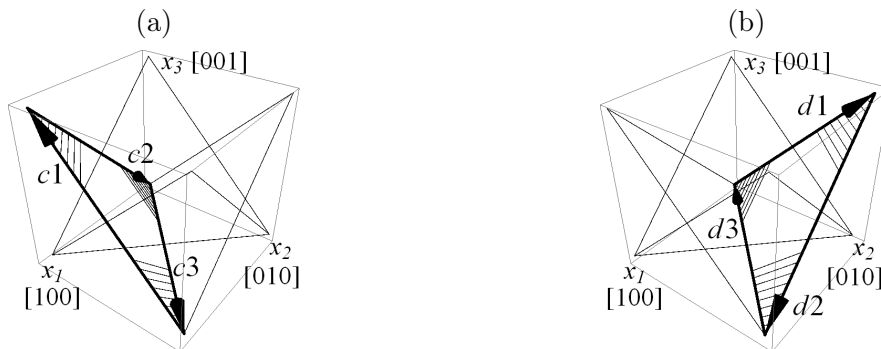
Tablica 2.2: Alternatywne oznaczenia systemów poślizgu w sieci typu r.s.c., wg pracy (Schmid & Boas, 1950).

„Primary”	„Conjugate”	„Cross-Glide”	„Critical”
$B4 = b2$	$C1 = d\bar{3}$	$D4 = c2$	$A3 = a2$
$B5 = b\bar{1}$	$C5 = d1$	$D1 = c\bar{3}$	$A6 = a1$
$B2 = b\bar{3}$	$C3 = d2$	$D6 = c1$	$A2 = a\bar{3}$

Wyniki pionierskich eksperymentów zawarte w pracach (Taylor & Elam, 1923) i (Taylor & Elam, 1925) wyjaśniają krystalograficzną naturę poślizgu. Mianowicie, w kryształach metali o typie sieci r.s.c. (oznaczanym symbolem A1) i należącym do regularnego układu krystalograficznego, poślizg plastyczny może zachodzić na 12 systemach. Do grupy metali o sieci typu A1 należą m.in. Al, Ag, Au, Cu, Ni. Zbiór wszystkich systemów poślizgu (czyli wszystkich par (\mathbf{n}, \mathbf{m})) w sieci typu r.s.c. jest oznaczany jako $\{111\}\langle 110\rangle$.



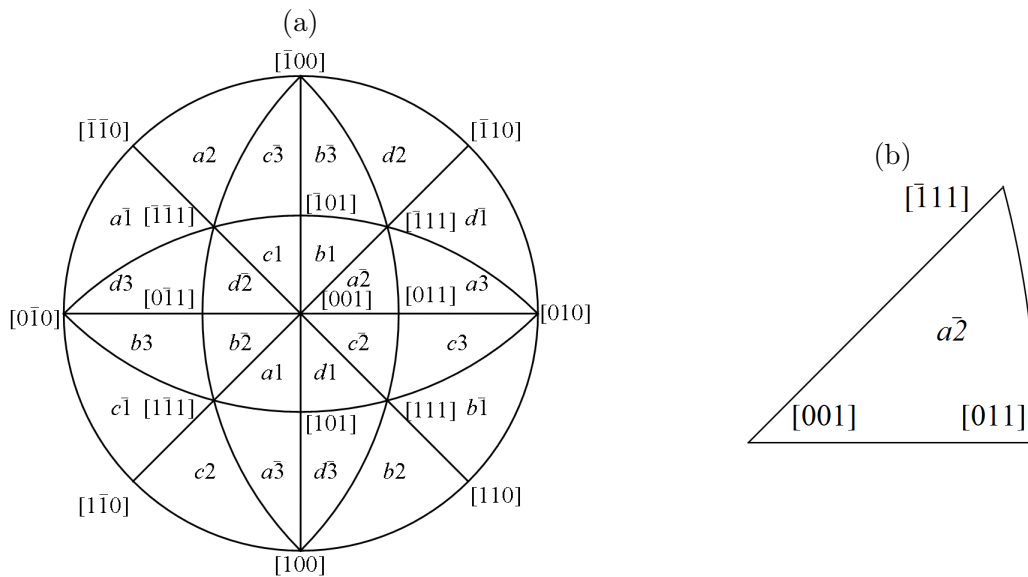
Rysunek 2.1: Systemy poślizgu na płaszczyźnie $a = (111)$ (a) i $b = (\bar{1}\bar{1}1)$ (b).



Rysunek 2.2: Systemy poślizgu na płaszczyźnie $c = (\bar{1}11)$ (a) i $d = (1\bar{1}1)$ (b).

W niniejszej pracy rozróżniany jest zwrot \mathbf{m} wektora poślizgu, tzn. dodatni \mathbf{m} i ujemny $-\mathbf{m}$ kierunek poślizgu. Dwa systemy różniące się jedynie zwrotem wektora poślizgu są traktowane jak dwa różne, a wówczas w kryształach typu r.s.c. rozróżniane są 24 systemy. Wykorzystywane tutaj oznaczenia systemów (tab. 2.1) zostały wprowadzone w pracy (Taylor, 1938b) i są obecnie stosowane m.in. w pracach (Havner, 2008), (Godfrey et al., 1998), (Basson & Driver, 2000). Pojedynczy system jest oznaczony symbolem „ αj ”, gdzie indeks $\alpha = a, b, c, d$ oznacza litery przyporządkowane każdej z czterech oktaedrycznych płaszczyzn poślizgu \mathbf{n} , natomiast indeks $j = 1, 2, 3$ oznacza cyfry określające trzy kierunki poślizgu \mathbf{m} . Obowiązuje zasada, według której kierunek poślizgu oznaczony indeksem j leży na przecięciu płaszczyzny oktaedrycznej o normalnej \mathbf{n} z płaszczyzną o normalnej $(j00)$. Trzymając się powyższych reguł można każdy z dwunastu dodatnich systemów poślizgu (tab. 2.1) przedstawić graficznie w postaci strzałki leżącej na trójkącie, por. rys. 2.1 i rys. 2.2, gdzie kierunki krystalograficzne $[100]$, $[010]$ i $[001]$ pokrywają się z osiami układu współrzędnych $K_C = \{X_i\}$, który jest wyznaczony przez ortonormalną bazę $\{\mathbf{e}_i\}$, gdzie $i = 1, 2, 3$. Systemy o przeciwnych zwrotach wektora \mathbf{m} w stosunku do wyjściowej dwunastki, czyli o ujemnym kierunku poślizgu $-\mathbf{m}$, są oznaczane kreską nad indeksem j , czyli $\bar{1}$, $\bar{2}$ i $\bar{3}$. W literaturze można znaleźć również inną, częściej stosowaną notację wg pracy (Schmid & Boas, 1950), następnie stosowaną w pracy (Basiński & Basiński, 1979), por. tab. 2.2.

Rzut stereograficzny



Rysunek 2.3: Standardowy rzut stereograficzny (a) kierunków komórki układu regularnego na płaszczyznę rzutu (001) z zaznaczonymi systemami poślizgu oraz podstawowy trójkąt stereograficzny (b).

Rzut stereograficzny jest tu traktowany jako narzędzie służące pokazaniu początkowej orientacji oraz obrotów sieci powstających podczas dużych deformacji kryształu. Rzut stereograficzny umożliwia przedstawienie kierunków i płaszczyzn, badanie kątów między kierunkami i płaszczyznami oraz ujawnia symetrię sieci krystalograficznej, por. (Przybyłowicz, 1999). Standardowy rzut stereograficzny powstanie, gdy za

tzw. „równikową” płaszczyznę rzutowania zostanie wybrana płaszczyzna krystalograficzna oznaczona tzw. niskimi wskaźnikami np. (001), (110), (111). Na rzucie standardowym głównych kierunków układu regularnego na płaszczyznę np. (001) można pokazać rzuty sześciu kół wielkich, które dzielą koło płaszczyzny rzutowania na 24 pola, por. rys. 2.3(a). Pola w postaci krzywoliniowych trójkątów są identyczne pod względem krystalograficznym i nazywane trójkątami podstawowymi. Podstawowy trójkąt stereograficzny ma naroża powstałe jak rzuty stereograficzne kierunków [001], [011], $[\bar{1}11]$ na płaszczyznę rzutowania (001), por. rys. 2.3(b).

W przypadku testu jednoosiowego rozciągania, trójkąt podstawowy jest stosowany do przedstawienia początkowej orientacji sieci kryształu, śledzenia obrotów sieci w czasie deformacji oraz pokazania działających systemów poślizgu. Jeżeli rzut osi rozciągania próbki na płaszczyznę krystalograficzną (001) w początkowej orientacji sieci, wypadnie wewnątrz trójkąta podstawowego to aktywowany zostanie system poślizgu o symbolu z wnętrza tego trójkąta, por. rys. 2.3(a). W przypadku sieci typu A1, wewnątrz każdego z tych trójkątów znajduje się oznaczenie jednego systemu poślizgu, który ma największą wartość naprężenia ścinającego i zostanie aktywowany, gdy początkowa orientacja osi rozciągania wypadnie w tym polu. Na skutek symetrii sieci typu r.s.c., początkowe zorientowanie osi rozciągania na obwodzie trójkąta, a szczególnie w jego narożach, powoduje identyczną największą wartość naprężenia ścinającego dla wielu systemów poślizgu. W efekcie występowania takich orientacji, podczas jednoosiowego rozciągania kryształu może pojawić się początkowy poślizg wielokrotny, por. punkt 6.1.5.

Oznaczenia wielkości i operacji tensorowych

W tekście niniejszej rozprawy symbol pisany pogrubioną czcionką małą literą, np. \mathbf{v} , oznacza tensor pierwszego rzędu (czyli o walencji 1) lub wektor. Symbol pisany wielką literą, jak np. \mathbf{T} , oznacza tensor drugiego rzędu (czyli o walencji 2), natomiast symbol pisany wielką literą i podwójną czcionką, np. \mathbb{C} , oznacza tensor czwartego rzędu. Wielkości skalarne oznaczane pochyloną czcionką literą alfabetu łacińskiego lub greckiego, np. γ , w , H to tensory o zerowej walencji. Dowolny wektor \mathbf{v} posiada reprezentację v_i w kartezjańskiej bazie $\{\mathbf{e}_i\}$, taką, że $\mathbf{v} = v_i \mathbf{e}_i$, gdzie $i = 1, 2, 3$. Tensor drugiego rzędu posiada reprezentację T_{ij} , taką, że $\mathbf{T} = T_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$, natomiast tensor czwartego rzędu o reprezentacji C_{ijkl} można zapisać w postaci $\mathbb{C} = C_{ijkl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$. Dolne litery indeksy $i, j, k, l = 1, 2, 3$ są nazywane wskaźnikami. Jeśli nie określono inaczej, to obowiązuje konwencja sumacyjna Einsteina oznaczająca sumowanie wyrażeń po powtarzających się wskaźnikach. W wyniku działania prostego nasunięcia $\mathbf{T} \mathbf{v}$ otrzymywany jest wektor o składowych $T_{ij} v_j$, natomiast rezultatem pełnego nasunięcia tensorów $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$ jest skalar $A_{ij} B_{ij}$. Pełne nasunięcie pary wektorów \mathbf{a} i \mathbf{b} można utożsamić z ich iloczynem skalarnym $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_i b_i$. Występujące powyżej, działanie oznaczone symbolem \otimes to iloczyn tensorowy, który dla pary wektorów \mathbf{a} i \mathbf{b} zdefiniowany jest poprzez działanie $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \mathbf{c} = (\mathbf{b} \cdot \mathbf{c}) \mathbf{a}$. Działanie na pojedynczym tensorze \mathbf{T} drugiego rzędu oznaczane jako $\overset{\text{T}}{\mathbf{T}}$ (lub w tekście jako \mathbf{T}^T) to tensor transponowany, natomiast $\overset{-1}{\mathbf{T}}$ (lub \mathbf{T}^{-1}) oznacza tensor odwrotny. Wyznacznik tensora drugiego rzędu jest oznaczany jako $\det(\mathbf{T})$. Symbole $\text{sym}(\mathbf{T})$ i $\text{skew}(\mathbf{T})$ oznaczają, odpowiednio, symetryczną i antysymetryczną część tensora \mathbf{T} , w związku z tym tensor $\text{sym}(\mathbf{T}) = \frac{1}{2}(\mathbf{T} + \overset{\text{T}}{\mathbf{T}})$ oraz $\text{skew}(\mathbf{T}) = \frac{1}{2}(\mathbf{T} - \overset{\text{T}}{\mathbf{T}})$. Symbol $\text{tr}(\)$ oznacza działanie zwiężenia po parze wskaźników, w przypadku tensora

drugiego rzędu $\text{tr}(\mathbf{T}) = T_{ii}$ to wielkość skalarna.

Prostokątna macierz o wymiarze $(n \times m)$ będzie oznaczana również pogrubioną czcionką lub jako składowe M^{IJ} ujęte w nawiasach prostokątnych $[M^{IJ}] = \mathbf{M}$, gdzie indeksy $I = 1, \dots, n; J = 1, \dots, m$. Macierz może być przedstawiona w postaci $[M^{IJ}]_{(n \times m)}$ z jawnym określeniem liczby n wierszy i m kolumn.

Występujące w niniejszej rozprawie górne indeksy K i L oznaczają kolejne numery systemów poślizgu plastycznego ($\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K$). Konwencja sumacyjna Einsteina nie dotyczy indeksów K i L , więc sumowanie po tych indeksach obowiązuje wówczas, gdy jawnie zostanie użyty znak sumy.

Moduły sprężystości materiału o symetrii kubicznej

Postać tensora \mathbb{C} modułów sprężystości materiałów o cechach symetrii kubicznej (ang. cubic symmetry), takich jak kryształy typu r.s.c. należące do regularnego układu krystalograficznego, przedstawiono m.in. w pracach (Nye, 1957), (Cowin & Mehrabadi, 1995), (Barnett, 1999).

Niech ortonormalne wersory bazy $\{\mathbf{e}_i\}$ lokalnego kartezjańskiego układu współrzędnych $K_C = \{X_i\}$ pokrywają się z trzema kierunkami krystalograficznymi $[100]$, $[010]$ i $[001]$ kryształu o sieci r.s.c.. Sieć typu r.s.c. posiada osie podwójnej, potrójnej i poczwórnej symetrii, te ostatnie to kierunki ($[100]$, $[010]$, $[001]$). Natomiast cechy symetrii kubicznej sieci r.s.c. wynikają z istnienia czterech kierunków $\langle 111 \rangle$, które są osiami potrójnej symetrii. Cechy sprężyste kryształu (materiału) o takiej symetrii można scharakteryzować przy pomocy trzech niezależnych stałych materiałowych. Wówczas, tensor \mathbb{C} modułów sprężystości kryształu o symetrii kubicznej można przedstawić w postaci sumy

$$\mathbb{C} = C_{1122} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2 C_{2323} \mathbb{I}^S + (C_{1111} - C_{1122} - 2 C_{2323}) \mathbb{I}^1 \quad (2.1)$$

trzech tensorów 4-go rzędu, gdzie tensor $\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ jest otrzymywany w postaci iloczynu tensorów $\mathbf{1}$ jednostkowych 2-go rzędu. Tensor \mathbb{I}^S jednostkowy symetryczny jest w postaci

$$\mathbb{I}^S = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \mathbb{I}^T), \quad \text{gdzie} \quad \begin{cases} \mathbb{I} = \delta_{ik} \delta_{jl} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l, \\ \mathbb{I}^T = \delta_{jk} \delta_{il} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l. \end{cases} \quad (2.2)$$

Symbol δ_{kl} oznacza deltę Kroneckera, a dolne indeksy $i, j, k, l = 1, 2, 3$. Tensor \mathbb{I}^1 4-go rzędu posiada składowe I_{ijkl}^1 o wartościach

$$I_{ijkl}^1 = \begin{cases} 1 & \text{jeśli } i = j = k = l, \\ 0 & \text{w pozostałych przypadkach.} \end{cases} \quad (2.3)$$

Symbole $C_{1111}, C_{1122}, C_{2323}$ oznaczają niezależne składowe tensora modułów sprężystości względem bazy $\{\mathbf{e}_i\}$ układu K_C . W przypadku materiału o symetrii kubicznej, charakteryzowanego tensorem \mathbb{C} czwartego rzędu o składowych C_{ijkl} , zachodzą równości $C_{1111} = C_{2222} = C_{3333}$, $C_{1122} = C_{1133} = C_{2233}$, $C_{2323} = C_{1313} = C_{1212}$, natomiast pozostałe składowe tensora \mathbb{C} pozostają zerowe. Składowe C_{ijkl} symetrycznego tensora modułów sprężystości \mathbb{C} (2.1) w bazie $\{\mathbf{e}_i\}$ (związanej z kierunkami kryształu na sposób powyżej opisany) można przedstawić w postaci

$$C_{ijkl} = C_{1122} \delta_{ij} \delta_{kl} + C_{2323} (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) + (C_{1111} - C_{1122} - 2 C_{2323}) I_{ijkl}^1. \quad (2.4)$$

W przypadku symetrii kubicznej można wprowadzić tzw. współczynnik anizotropii kubicznej Zenera w postaci stosunku $A = \frac{C_{1111} - C_{1122}}{2C_{2323}}$. Gdy materiał jest izotropowy współczynnik $A = 1$, więc znika ostatni człon ujęty w okrągłych nawiasach wzorów (2.1) i (2.4).

Wartości modułów sprężystości C_{ijkl} materiału muszą spełniać ograniczenia wynikające z warunku dodatniej określoności gęstości energii w odkształceń sprężystych. Warunek dodatniej określoności nakładany jest na formę biliniową w postaci

$$w = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij} e_{kl} = \frac{1}{2} \mathbf{e} \cdot \mathbb{C} \cdot \mathbf{e} > 0, \quad \forall \mathbf{e} \neq \mathbf{0}. \quad (2.5)$$

Z powyższej nierówności wynika, że jedynie dla odkształcenia $\mathbf{e} = \mathbf{0}$ gęstość energii $w = 0$, gdzie \mathbf{e} i $\mathbf{0}$ to tensory drugiego rzędu. Z warunku (2.5) dodatniej określoności gęstości energii w wynika wniosek, że tensor czwartego rzędu \mathbb{C} musi być dodatnio określony, a więc jego wartości własne muszą być dodatnie. Można pokazać, że macierz modułów sprężystości utworzona ze składowych tensora wg notacji Kelvina (a tym samym tensora \mathbb{C}) posiada sześć wartości własnych, por. (Rychlewski, 1984), (Mehrabadi & Cowin, 1990). Dla symetrii kubicznej są to, odpowiednio, pojedyncza wartość $C_{1111} + 2C_{1122}$, podwójna wartość $C_{1111} - C_{1122}$ oraz potrójna $2C_{2323}$. Warunek dodatniej określoności \mathbb{C} narzuca nierówności

$$C_{1111} + 2C_{1122} > 0, \quad C_{1111} - C_{1122} > 0, \quad C_{2323} > 0. \quad (2.6)$$

Z powyższych dwóch pierwszych nierówności wynika ograniczenie $C_{1111} > 0$.

W przypadku materiału izotropowego cechy sprężyste określają dwie niezależne stałe, np. przyjmowane jako stałe Lamégo $\lambda = C_{1122} = C_{1111} - 2C_{2323}$ oraz $\mu = C_{2323}$. Wówczas w tensorze modułów sprężystości (2.1) znika ostatni człon, natomiast ograniczenia (2.6) nakładane na wartości składowych można uprościć do pierwszej i ostatniej nierówności.

Ze względu na symetrie składowych tensora \mathbb{C}^* , w dalszej części pracy używany będzie skrócony zapis dolnych wskaźników, por. (Mehrabadi & Cowin, 1990). Poczwórne dolne indeksy zostaną zastąpione podwójnymi, czyli $C_{11} = C_{1111}$, $C_{12} = C_{1122}$ i $C_{44} = C_{2323}$.

2.2 Model kinematyki deformacji w kryształach

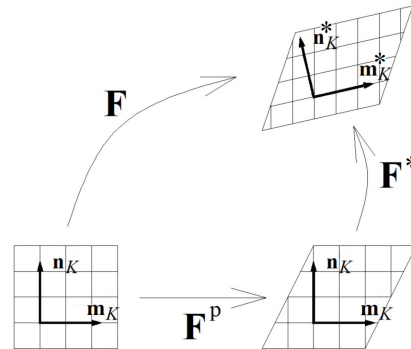
Prace (Hill, 1966), (Lee, 1969), (Rice, 1971), (Hill & Rice, 1972), (Asaro & Rice, 1977), (Asaro, 1983a), (Asaro, 1983b), (Bassani, 1994) mają kluczowe znaczenie w dziedzinie modelowania sprężysto-plastycznych deformacji kryształów.

Wszystkie występujące tu wielkości są określone w punkcie materialnym \mathbf{X} ciągłego ciała \mathcal{B} , które w ustalonym układzie odniesienia zajmuje obszar Ω o objętości V . Konfiguracja początkowa jest oznaczona jako \mathcal{C}^0 , natomiast konfiguracja aktualna jako \mathcal{C} . Konfiguracja odciążona \mathcal{C}^p jest otrzymywana w wyniku sprężystego odciążenia cząstki materialnej.

Poniżej (jak i w całym tekście) symbole wartości funkcji nie są odróżniane od symboli samych funkcji. Gęstości występujących wielkości są ustalone na jednostkę objętości w konfiguracji odniesienia.

W klasycznym opisie odkształceń plastycznych kryształów, (Hill & Rice, 1972), (Asaro, 1983a), (Asaro, 1983b), (Bassani, 1994), materiał płynie przez sieć kryształu za przyczyną ruchu dyslokacji, natomiast sieć przejmuje jedynie deformacje sprężyste.

Poślizg plastyczny na systemach krystalograficznych nie wpływa więc na deformację sieci kryształu.



Rysunek 2.4: Schemat deformacji sieci i materiału w kryształach.

Zgodnie z pracą (Lee, 1969), dla każdego punktu materialnego \mathbf{X} , zakładany jest sprężysto-plastyczny multiplikatywny rozkład tensora gradientu deformacji \mathbf{F} :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^p, \quad \text{gdzie} \quad \det(\mathbf{F}^*) > 0 \quad \text{oraz} \quad \det(\mathbf{F}^p) = 1. \quad (2.7)$$

Tensor \mathbf{F}^p określa plastyczną część gradientu deformacji. Plastyczna deformacja powstaje w efekcie skumulowania deformacji na aktywnych systemach poślizgu ($\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K$) i nie towarzyszy jej zmiana objętości, więc $\det(\mathbf{F}) = \det(\mathbf{F}^*)$. Kryształy metali zdeformowane w zakresie plastycznym wykazują silną anizotropię odpowiedzi, więc zastosowany model materiału musi uwzględniać te efekty. Deformacja sieci kryształu (obroty i rozciągnięcia) jest określana przez tensor \mathbf{F}^* sprężystej części gradientu deformacji, por. rys. 2.4.

Przyjmuje się, że w trakcie deformacji kryształu, wektory wyznaczające kierunki i płaszczyzny poślizgu podlegają obrotom i rozciągnięciom, por. (Asaro, 1983b). Sprężysta część gradientu deformacji \mathbf{F}^* wyznacza aktualne kierunki wektorów poślizgu \mathbf{m}^{*K} i normalnych do płaszczyzn poślizgu \mathbf{n}^{*K} według wzorów:

$$\mathbf{m}^{*K} = \mathbf{F}^* \mathbf{m}^K, \quad \mathbf{n}^{*K} = \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{n}^K, \quad (2.8)$$

gdzie wskaźnik K oznacza numer jednego z n_s systemów poślizgu ($\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K$). Każdy z liczby n_s systemów, oznaczony symbolami „ αj ” wg pracy (Taylor, 1938b) (tab. 2.1 zawiera systemy dodatnie), posiada przyporządkowany w dowolnie określony sposób numer K , gdzie $K = 1, \dots, n_s$ oraz $n_s = 24$ dla kryształu typu r.s.c.. Wersory wyznaczające kierunki i płaszczyzny poślizgu plastycznego są ortonormalne w konfiguracji początkowej \mathcal{C}^0 , więc $\mathbf{m}^K \cdot \mathbf{n}^K = 0$. W procesie deformacji kryształu wektory ($\mathbf{n}^{*K}, \mathbf{m}^{*K}$) pozostają ortogonalne choć już nie jednostkowe, więc ich iloczyn skalarny wynosi zawsze $\mathbf{m}^{*K} \cdot \mathbf{n}^{*K} = 0$.

Wykorzystując multiplikatywny rozkład (2.7) tensora \mathbf{F} , (eulerowski) gradient prędkości deformacji \mathbf{l} (w konfiguracji aktualnej \mathcal{C}) można rozłożyć addytywnie na dwa człony

$$\mathbf{l} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \underbrace{\dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^{*-1}}_{\mathbf{l}^*} + \underbrace{\mathbf{F}^* \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} \mathbf{F}^{*-1}}_{\mathbf{l}^p}. \quad (2.9)$$

Występujące powyżej wyrażenie $\dot{\mathbf{F}}$ oznacza pochodną materialną tensora \mathbf{F} , która jest miarą prędkości zmiany danego tensora (lub dowolnej wielkości). Prędkość plastycznego płynięcia można przedstawić w formie sumy prędkości plastycznych ścięć na K systemach poślizgu, zaproponowanej w pracy (Rice, 1971), w postaci

$$\dot{\mathbf{F}}^{\text{P}} \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} = \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \mathbf{s}^K, \quad (2.10)$$

gdzie diada $\mathbf{s}^K = \mathbf{m}^K \otimes \mathbf{n}^K$ jest określona w konfiguracji początkowej \mathcal{C}^0 , a $\overset{\circ}{\gamma}^K \geq 0$ oznacza mnożnik plastyczny określający prędkość ścinania na systemie K wyznaczonym przez tensor \mathbf{s}^K . Symbol $\overset{\circ}{\gamma}^K$ zamiast $\dot{\gamma}^K$ wprowadzono tu dla podkreślenia, że wartość γ^K nie jest parametrem wewnętrznymi stanu. Równoważne prawo plastycznego płynięcia w konfiguracji aktualnej \mathcal{C} przyjmuje postać

$$\mathbf{l}^{\text{P}} = \mathbf{F}^* \dot{\mathbf{F}}^{\text{P}} \mathbf{F}^{\text{P}^{-1}} \mathbf{F}^{*-1} = \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \mathbf{s}^{*K}, \quad (2.11)$$

gdzie $\mathbf{s}^{*K} = \mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K}$ jest tzw. tensorem Schmid'a. Każdą z diad \mathbf{s}^{*K} można przedstawić w postaci sumy $\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K} = \mathbf{p}^{*K} + \mathbf{w}^{*K}$, odpowiednio części symetrycznej i antysymetrycznej:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}^{*K} &= \text{sym}(\mathbf{s}^{*K}) = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K} + \mathbf{n}^{*K} \otimes \mathbf{m}^{*K}), \\ \mathbf{w}^{*K} &= \text{skew}(\mathbf{s}^{*K}) = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K} - \mathbf{n}^{*K} \otimes \mathbf{m}^{*K}). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Tensory gradientu prędkości \mathbf{l} , \mathbf{l}^* , \mathbf{l}^{P} (2.9) można rozbić na części symetryczne i antysymetryczne, np. $\mathbf{l} = \mathbf{d} + \boldsymbol{\omega}$, gdzie $\mathbf{d} = \text{sym}(\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1})$ jest tensorem eulerowskiej prędkości deformacji, $\boldsymbol{\omega} = \text{skew}(\dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1})$ to tensor chwilowej prędkości obrotowej (tensor spinu materialnego). Tensor gradientu prędkości deformacji (2.9) przyjmuje postać

$$\mathbf{l} = \underbrace{\mathbf{d}^* + \boldsymbol{\omega}^*}_{\mathbf{l}^*} + \underbrace{\mathbf{d}^{\text{P}} + \boldsymbol{\omega}^{\text{P}}}_{\mathbf{l}^{\text{P}}}, \quad (2.13)$$

gdzie jawnie występują symetryczne i antysymetryczne części sprężyste i plastyczne. Na podstawie wzorów (2.11) i (2.12) można napisać

$$\mathbf{d}^{\text{P}} = \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \mathbf{p}^{*K}, \quad \boldsymbol{\omega}^{\text{P}} = \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \mathbf{w}^{*K}. \quad (2.14)$$

Wykorzystując równania (2.8) oraz definicję gradientu prędkości deformacji sprężystej $\mathbf{l}^* = \dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^{*-1}$ można napisać równania dla prędkości wektorów \mathbf{m}^{*K} i \mathbf{n}^{*K} w postaci

$$\dot{\mathbf{m}}^{*K} = \mathbf{l}^* \mathbf{m}^{*K}, \quad \dot{\mathbf{n}}^{*K} = -\mathbf{l}^{*\text{T}} \mathbf{n}^{*K}. \quad (2.15)$$

Przy użyciu związków (2.15) oraz rozkładu $\mathbf{l}^* = \mathbf{d}^* + \boldsymbol{\omega}^*$ sprężystej części tensora gradientu prędkości (2.13), można wyznaczyć, potrzebne później równanie dla prędkości tensora \mathbf{p}^{*K} (2.12) symetrycznej części diad \mathbf{s}^{*K} , czyli

$$\dot{\mathbf{p}}^{*K} = \mathbf{d}^* \mathbf{w}^{*K} - \mathbf{w}^{*K} \mathbf{d}^* + \boldsymbol{\omega}^* \mathbf{p}^{*K} - \mathbf{p}^{*K} \boldsymbol{\omega}^*. \quad (2.16)$$

2.3 Hipersprężysty model materiału w otoczeniu konfiguracji odciążonej

W niniejszej rozprawie wprowadzone jest założenie, por. (Hill & Havner, 1982), że sprężyste zachowanie kryształu opisuje hipersprężysty związek konstytutywny wprowadzony w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P . Materiał jest nazywany hipersprężystym lub sprężystym w sensie Greena, jeśli istnieje skalarna funkcja gęstości energii odkształceń sprężystych nazywana potencjałem sprężystym, zależna tylko od lokalnej deformacji, por. (Truesdell & Noll, 1965). Pomijane są tu efekty termiczne, więc można pokazać, że funkcja gęstości energii swobodnej Helmholtza w procesach izotermicznych odpowiada funkcji gęstości energii odkształceń sprężystych

$$\tilde{w} = \tilde{w}(\mathbf{F}^*). \quad (2.17)$$

Gęstość energii \tilde{w} zależy jedynie od lokalnej deformacji poprzez tensor \mathbf{F}^* sprężystej części gradientu deformacji. Równanie konstytutywne materiału hipersprężystego jest w postaci tensorowej funkcji \mathbf{S}^* drugiego rzędu wyznaczonej jako pochodna cząstkowa skalarnej funkcji \tilde{w} gęstości energii odkształceń sprężystych po tensorze \mathbf{F}^*

$$\mathbf{S}^* = \frac{\partial \tilde{w}(\mathbf{F}^*)}{\partial \mathbf{F}^*}, \quad (2.18)$$

gdzie symbol \mathbf{S}^* oznacza niesymetryczny, pierwszy tensor Pioli-Kirchhoffa określony względem konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P .

Funkcja gęstości energii odkształceń sprężystych \tilde{w} musi spełniać warunek obiektywności, $\tilde{w}(\mathbf{Q}\mathbf{F}) = \tilde{w}(\mathbf{F})$, dla wszystkich \mathbf{Q} , takich, że $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T$, czyli niezmienniczość przy sztywnych obrotach \mathbf{Q} po deformacji \mathbf{F} . Z wymogu obiektywności wynika wniosek, że gęstość energii \tilde{w} jest funkcją prawego tensora rozciągnięcia \mathbf{U} , który jest wielkością obiektywną typu Lagrange'a. Natomiast wygodniej będzie wykorzystać prawy tensor Cauchy-Greena $\mathbf{C} = \mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$, będący również wielkością obiektywną typu Lagrange'a. Wówczas funkcja gęstości energii sprężystej przyjmuje postać

$$\tilde{w}(\mathbf{F}^*) = \check{w}(\mathbf{C}^*), \quad (2.19)$$

gdzie symbol $\mathbf{C}^* = \mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^*$ to sprężysty prawy tensor Cauchy-Greena.

Związek konstytutywny (2.18) można przekształcić wykorzystując równość (2.19), definicję pochodnej tensora drugiego rzędu względem tensora drugiego rzędu oraz symetrię tensora \mathbf{C}^* do postaci

$$\mathbf{S}^* = \frac{\partial \check{w}(\mathbf{C}^*)}{\partial \mathbf{C}^*} \cdot \frac{\partial \mathbf{C}^*}{\partial \mathbf{F}^*} = 2 \mathbf{F}^* \frac{\partial \check{w}(\mathbf{C}^*)}{\partial \mathbf{C}^*}. \quad (2.20)$$

Z ostatniej z powyższych równości wynika związek konstytutywny dla \mathbf{T}^* drugiego tensora naprężenia Pioli-Kirchhoffa odniesiony do konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P

$$\mathbf{T}^* = 2 \frac{\partial \check{w}(\mathbf{C}^*)}{\partial \mathbf{C}^*} \quad (2.21)$$

oraz znany wzór $\mathbf{S}^* = \mathbf{F}^* \mathbf{T}^*$. Funkcję gęstości energii odkształceń sprężystych \check{w} można wyrazić przez zdefiniowany w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P tensor odkształcenia sprężystego Greena

$$\mathbf{E}^* = \frac{1}{2} (\mathbf{C}^* - \mathbf{1}), \quad (2.22)$$

w związku z tym zachodzi równość $\check{w}(\mathbf{C}^*) = w^*(\mathbf{E}^*)$. Ostatecznie, hipersprężysty związek konstytutywny w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P , gdy funkcja w^* gęstości energii odkształceń sprężystych zależy od odkształcenia Greena \mathbf{E}^* , również w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P , można przedstawić w postaci

$$\mathbf{T}^* = \frac{\partial w^*(\mathbf{E}^*)}{\partial \mathbf{E}^*}. \quad (2.23)$$

Z istnienia funkcji w^* gęstości energii odkształceń sprężystych, która jest potencjałem dla naprężeń \mathbf{T}^* wynika wniosek, że praca wykonana na hipersprężystym materiale jest niezależna od ścieżki deformacji. Na dowolnej ścieżce deformacji sprężystych praca wykonana na materiale zależy tylko od stanu początkowego i końcowego.

2.4 Przyrostowe moduły sprężystości

Związek konstytutywny dla prędkości naprężenia można wyznaczyć, obliczając pochodną tensora \mathbf{T}^* danego wzorem (2.23) względem czasu, w postaci

$$\dot{\mathbf{T}}^* = \mathbb{C}^* \cdot \dot{\mathbf{E}}^*, \quad \mathbb{C}^* = \frac{\partial w^*}{\partial \mathbf{E}^* \partial \mathbf{E}^*}. \quad (2.24)$$

Tensor czwartego rzędu \mathbb{C}^* modułów sprężystości nazywany drugim tensorem sprężystości jest odniesiony do konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P . Składowe C_{ABCD}^* tensora \mathbb{C}^* w kartezjańskiej polibazie $\mathbf{e}_A \otimes \mathbf{e}_B \otimes \mathbf{e}_C \otimes \mathbf{e}_D$ spełniają warunki symetrii względem par indeksów $C_{ABCD}^* = C_{CDAB}^*$ oraz pozostałe symetrie wewnątrz par indeksów wynikające z symetrii tensora naprężenia, czyli $C_{ABCD}^* = C_{BACD}^*$, gdzie wskaźniki $A, B, C, D = 1, 2, 3$. W dalszej części niniejszej rozprawy obowiązywać będzie założenie, że składowe C_{ABCD}^* nie zależą od odkształcenia i w przypadku kryształu typu r.s.c. są w postaci (2.4).

Uzasadnieniem użycia miary \mathbf{E}^* oraz założenia niezależności tensora \mathbb{C}^* od stanu odkształcenia jest fakt występowania małego zakresu odkształceń sprężystych podczas deformacji kryształów metali przy zwykle stosowanych ciśnieniach. Nie ma tu potrzeby wykorzystywania np. logarytmicznych miar odkształceń sprężystych, które powodują pewne trudności, np. numeryczne.

Związek konstytutywny dla prędkości w konfiguracji aktualnej \mathcal{C} można wyznaczyć, korzystając z tensora τ naprężenia Kirchhoffa

$$\tau = \mathbf{F}^* \mathbf{T}^* \mathbf{F}^{*\top} = \det(\mathbf{F}^*) \sigma, \quad (2.25)$$

gdzie σ jest podstawowym tensorem naprężenia Cauchy'ego w konfiguracji aktualnej \mathcal{C} . Następnie, skorzystamy z transformacji (ang. push-forward), odpowiednio, pochodnych drugiego tensora naprężenia Pioli-Kirchhoffa (2.24) i tensora odkształcenia Greena (2.22), z konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P do aktualnej \mathcal{C}

$$\mathbf{F}^* \dot{\mathbf{T}}^* \mathbf{F}^{*\top} = \dot{\tau} - \mathbf{l}^* \tau - \tau \mathbf{l}^{*\top} \equiv \mathcal{L}_{\mathbf{v}}^* \tau, \quad (2.26)$$

$$\mathbf{F}^{*\top} \dot{\mathbf{E}}^* \mathbf{F}^{*-1} = \mathbf{d}^*.$$

Powyżej wykorzystano formułę określającą transformację (ang. pull-back) $\mathbf{T}^* = \mathbf{F}^{*-1} \tau \mathbf{F}^{*\top}$ tensora naprężenia τ z konfiguracji aktualnej \mathcal{C} do odciążonej \mathcal{C}^P oraz wyrażenie na

pochną tensora odwrotnego $(\mathbf{F}^*)^{-1} = -\dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^* \mathbf{F}^*$. Pochodna Liego tensora naprężenia Kirchhoffa $\mathcal{L}_v^* \tau$ jest wielkością obiektywną, por. (Simo & Hughes, 1998). Związek konstytutywny dla naprężeń (2.24) można przetransformować do konfiguracji aktualnej \mathcal{C} , przy użyciu wzorów związku (2.26) i przedstawić w postaci

$$\mathcal{L}_v^* \tau = \mathbf{c} \cdot \mathbf{d}^*, \quad (2.27)$$

gdzie $\mathbf{c} = \mathbf{F}^* \star \mathbb{C}^*$ jest tensorem czwartego rzędu nazywanym tensorem przestrzennych modułów sprężystości. Tensor \mathbf{c} powstał w wyniku prostego nasunięcia na \mathbb{C}^* czterech tensorów \mathbf{F}^* . W celu uproszczenia zapisu działanie prostego nasunięcia oznaczono powyżej jako \star . Składowe tensora \mathbf{c} ze związku (2.27) są w polibazie $\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$ obliczane w postaci

$$c_{ijkl} = F_{iA}^* F_{jB}^* F_{kC}^* F_{lD}^* C_{ABCD}^*. \quad (2.28)$$

Powyżej zachowane są symetrie składowych tensora \mathbf{c} przestrzennych modułów, czyli zachodzą równości $c_{ijkl} = c_{jikl} = c_{klij}$.

Pochodną Liego naprężenia Kirchhoffa można związać z pochodną Zaremby-Jaumanna $\nabla^* \tau = \dot{\tau} - \omega^* \tau + \tau \omega^*$ w postaci

$$\nabla^* \tau = \mathcal{L}_v^* \tau + \mathbf{d}^* \tau + \tau \mathbf{d}^*, \quad (2.29)$$

przy wykorzystaniu pierwszego ze wzorów (2.26) oraz gradientu prędkości deformacji $\mathbf{l}^* = \dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^*$ rozłożonego w postaci sumy $\mathbf{d}^* + \omega^*$ tensora symetrycznego i antysymetrycznego, por. (2.13). Równanie konstytutywne dla naprężenia Kirchhoffa τ (2.27) można przedstawić w klasycznej postaci

$$\nabla^* \tau = \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{d}^*, \quad (2.30)$$

znanej m.in. z prac (Hill & Rice, 1972), (Asaro, 1983a), (Asaro, 1983b) i (Bassani, 1994). Związek konstytutywny (2.30) łączy pochodną $\nabla^* \tau$ Zaremby-Jaumanna tensora Kirchhoffa, współobrotową z siecią kryształu, ze sprężystą częścią tensora prędkości odkształcenia $\mathbf{d}^* = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^* + \mathbf{F}^* \dot{\mathbf{F}}^{*\top})$.

Składowe tensora modułów sprężystości \mathbb{L}^* w związku konstytutywnym (2.30) spełniają symetrie względem par dolnych indeksów $L_{ijkl}^* = L_{klij}^*$, ale wymagają dodatkowej symetryzacji, aby prawdziwe stały się równości $L_{ijkl}^* = L_{jikl}^* = L_{ijlk}^*$. W pełni symetryczna postać składowych tensora \mathbb{L}^* ,

$$L_{ijkl}^* = c_{ijkl}^* + \frac{1}{2}(\delta_{ik} \tau_{lj} + \delta_{jl} \tau_{ik} + \delta_{il} \tau_{kj} + \delta_{jk} \tau_{il}), \quad (2.31)$$

jest zgodna z założeniem hipersprężystości materiału w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^p .

2.5 Związki konstytutywne modelu z wieloma systemami poślizgu

W klasycznym modelu deformacji kryształu znajomość prędkości plastycznych ścięć $\overset{\circ}{\gamma}^K$ na systemach poślizgu jest kluczowa w wyznaczaniu plastycznej części deformacji (2.11).

Stopień aktywności systemów poślizgu plastycznego jest określany przez powyżej wprowadzone skalarne parametry $\overset{\circ}{\gamma}^K$ oraz funkcje f^K , określone poniżej, tworzące powierzchnię plastyczności kryształu. Nieaktywnym systemom poślizgu odpowiadają $\overset{\circ}{\gamma}^K = 0$ i $f^K < 0$; w przypadku, gdy K -ty system poślizgu jest aktywny, to $\overset{\circ}{\gamma}^K > 0$ i $f^K = 0$.

W każdej chwili deformację dopuszczalną kryształu, w tak sformułowanym zadaniu, wyznaczają warunki aktywacji mechanizmów plastycznego płynięcia (określane jako ang. complementary conditions lub warunki Kuhna-Tuckera w teorii optymalizacji)

$$\overset{\circ}{\gamma}^K \geq 0, \quad f^K \leq 0, \quad f^K \overset{\circ}{\gamma}^K = 0 \quad (\text{nie sumować po } K). \quad (2.32)$$

Rozwiązanie zadania przyrostowego jest otrzymywane z przyrostowych warunków zgodności (ang. consistency conditions) w formie

$$\dot{f}^K \leq 0, \quad \dot{f}^K \overset{\circ}{\gamma}^K = 0 \quad \text{dla } K \in \mathcal{P} = \{L : f^L = 0\}, \quad (2.33)$$

bez sumowania po indeksie K , które dotyczą tylko zbioru potencjalnie aktywnych systemów poślizgu \mathcal{P} , jednocześnie $\overset{\circ}{\gamma}^K = 0$ dla systemów $K \notin \mathcal{P}$. Powyższe przyrostowe warunki zgodności (2.33) wynikają z różniczkowania warunków aktywacji (2.32) względem czasu.

Gdy znane będzie rozwiązanie zagadnienia przyrostowego, a tym samym zostaną zidentyfikowane płynące w danej chwili systemy $(\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K)$, to można określić zbiór \mathcal{A} aktywnych systemów poślizgu,

$$\mathcal{A} = \{L : \overset{\circ}{\gamma}^L > 0\}, \quad \mathcal{A} \subseteq \mathcal{P}. \quad (2.34)$$

Powyżej sformułowane zagadnienie przyrostowe należy uzupełnić o komplet wzorów określających zmianę stanu naprężenia i wartości funkcji plastyczności w trakcie deformacji.

Związek (2.30) jest punktem wyjścia do sformułowania równania konstytutywnego dla naprężeń z uwzględnieniem wielu mechanizmów plastycznego płynięcia (czyli wielu systemów poślizgu) w modelu sprężysto-plastycznego kryształu. Sprężyste części tensora prędkości odkształcenia oraz chwilowej prędkości obrotowej można określić, odpowiednio, jako $\mathbf{d}^* = \mathbf{d} - \mathbf{d}^P$ i $\boldsymbol{\omega}^* = \boldsymbol{\omega} - \boldsymbol{\omega}^P$. Następnie należy wykorzystać wyrażenia (2.14) określające plastyczne człony \mathbf{d}^P i $\boldsymbol{\omega}^P$ jako zależne od prędkości plastycznych ścieg $\overset{\circ}{\gamma}^K$. Zmiany naprężenia względem ustalonej bazy zewnętrznej (laboratoryjnej) wynikać będą z pochodnej Zaremby-Jaumanna tensora naprężenia Kirchhoffa $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \dot{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\tau} + \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{\omega}$ współobrotowej z materiałem, po przekształceniach wyrażonej wzorem

$$\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{d} - \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \boldsymbol{\lambda}^{PK}. \quad (2.35)$$

Kierunek prędkości plastycznego płynięcia materiału wyznacza tu zbiór tensorów $\boldsymbol{\lambda}^{PK}$,

$$\boldsymbol{\lambda}^{PK} = \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*K} + \boldsymbol{\beta}^{*K}, \quad (2.36)$$

gdzie symbol $\boldsymbol{\beta}^{*K}$ oznacza symetryczne tensory 2-go rzędu, które wyznaczają różnicę pochodnych Zaremby-Jaumanna $\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}^* - \overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} = \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \boldsymbol{\beta}^{*K}$ wynikającą z obrotów sieci kryształu, w postaci wzoru

$$\boldsymbol{\beta}^{*K} = \mathbf{w}^{*K} \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \mathbf{w}^{*K}, \quad \boldsymbol{\beta}^{*K} = \overset{T}{\boldsymbol{\beta}^{*K}}. \quad (2.37)$$

Wypadkowe naprężenie ścinające τ^K każdego z systemów poślizgu jest zdefiniowane (Hill & Havner, 1982) tak, że iloczyn $\tau^K \overset{\circ}{\gamma}^K$ (bez sumowania po indeksie K) jest równy prędkości pracy plastycznej (na jednostkę objętości w konfiguracji odniesienia) wynikającej z poślizgu na K -tym systemie $(\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K)$. W wyniku poślizgów na kilku systemach uogólniona prędkość pracy ma postać $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{d}^P = \sum_{K=1}^{n_S} \overset{\circ}{\gamma}^K \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}^{*K}$. Wówczas, można zidentyfikować wypadkowe naprężenie ścinające dla K -tego systemu, nazywane naprężeniem Schmid'a, jako rzut symetrycznego tensora naprężenia Kirchhoff'a $\boldsymbol{\tau}$ na K -ty system poślizgu

$$\tau^K = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{p}^{*K}. \quad (2.38)$$

Zgodnie z prawem Schmid'a poślizg plastyczny na systemie K wystąpi, gdy wypadkowe naprężenie ścinające τ^K osiągnie wartość krytyczną τ_{cr}^K .

Funkcje plastyczności f^K są zdefiniowane dla każdego systemu poślizgu K w postaci różnicy wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K na systemie K i krytycznej (progowej) wartości naprężenia ścinającego τ_{cr}^K ,

$$f^K = \tau^K - \tau_{cr}^K. \quad (2.39)$$

W chwili gdy wypadkowe naprężenie ścinające na systemie K osiągnie wartość progową (krytyczną), czyli $f^K = 0$, może nastąpić poślizg plastyczny K -tego systemu. Liczba funkcji plastyczności jest równa liczbie systemów poślizgu w kryształach. Każda z funkcji plastyczności f^K określa, kiedy odpowiadający jej jeden system poślizgu $(\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K)$ może być aktywny. Przyjęto tu, że liczba powierzchni plastyczności n_S (czyli liczba systemów poślizgów dodatnich i ujemnych) jest równa liczbie zmiennych wewnętrznych τ_{cr}^K .

Prędkość wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K obliczana jest jako pochodna materialna $\dot{\tau}^K = \dot{\boldsymbol{\tau}} \cdot \mathbf{p}^{*K} + \boldsymbol{\tau} \cdot \dot{\mathbf{p}}^{*K}$. Potrzebną w przekształceniach pochodną $\overset{\nabla}{\mathbf{p}}^{*K}$ Zaremby-Jaumann'a tensora \mathbf{p}^{*K} (współobrotową z siecią kryształu) można wyznaczyć z wykorzystaniem wzoru (2.16) i przedstawić w postaci $\overset{\nabla}{\mathbf{p}}^{*K} = \mathbf{d}^* \mathbf{w}^{*K} - \mathbf{w}^{*K} \mathbf{d}^*$. Przy użyciu związku konstytutywnego (2.30) oraz równości $\boldsymbol{\tau} \cdot \overset{\nabla}{\mathbf{p}}^{*K} = \boldsymbol{\beta}^{*K} \cdot \mathbf{d}^*$, por. (2.37), pochodna $\dot{\tau}^K$ przyjmuje postać

$$\dot{\tau}^K = (\mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*K}) \cdot \mathbf{d}^* + \boldsymbol{\beta}^{*K} \cdot \mathbf{d}^* = \boldsymbol{\lambda}^K \cdot \mathbf{d}^*, \quad (2.40)$$

gdzie $\boldsymbol{\lambda}^K = \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*K} + \boldsymbol{\beta}^{*K}$. Przy czysto sprężystej, wirtualnej prędkości odkształcenia $\mathbf{d}^* = \dot{\mathbf{d}}$ skierowanej ortogonalnie do $\boldsymbol{\lambda}^K$ otrzymujemy $\dot{f}^K = \dot{\tau}^K = 0$. Oznacza to, że tensor $\boldsymbol{\lambda}^K$ jest ortogonalny do powierzchni plastyczności f^K w przestrzeni odkształceń mierzonych względem konfiguracji aktualnej \mathcal{C} . Natomiast $\boldsymbol{\mu}^K = \mathbf{p}^{*K} + \overset{-1}{\mathbb{L}^*} \cdot \boldsymbol{\beta}^{*K} = \overset{-1}{\mathbb{L}^*} \cdot \boldsymbol{\lambda}^K$ oznacza tensor normalny do f^K w przestrzeni naprężeń, przy czym jest istotne, że miara tych naprężeń jest sprzężona, wskutek (2.30), z logarytmiczną miarą odkształcenia względem konfiguracji aktualnej (Hill, 1968). Ze wzoru (2.36) oraz powyższego wyjaśnienia wielkości $\boldsymbol{\lambda}^K$ występującej w związku (2.40), wynika fundamentalna równość

$$\boldsymbol{\lambda}^K = \boldsymbol{\lambda}^{PK} \quad (2.41)$$

tensora ortogonalnego do powierzchni plastyczności i tensora kierunku prędkości plastycznego płynięcia. Jest to konsekwencja zastosowania prawa Schmid'a przy użyciu wypadkowego naprężenia ścinającego zdefiniowanego równaniem (2.38), określaną miarą stowarzyszonego prawa plastycznego płynięcia dla kryształu.

Równania opisujące zmianę wartości krytycznych naprężeń ścinających τ_{cr}^K , por. (2.39), nazywane uogólnionym prawem wzmocnienia (Hill, 1966), określają tzw. wzmocnienie systemów poślizgu,

$$\dot{\tau}_{cr}^K = \sum_{L=1}^{n_S} h^{*KL} \dot{\gamma}^L, \quad (2.42)$$

występujące podczas procesu deformacji plastycznej materiału. Wartości chwilowych modułów wzmocnienia h^{*KL} są w ogólności zależne od całej historii deformacji¹. Przegląd najpopularniejszych z proponowanych w literaturze praw wzmocnienia (czyli postaci macierzy modułów wzmocnienia) przedstawiono w punkcie 2.7.

Tablica 2.3: Podsumowanie najważniejszych związków konstytutywnych modelu deformacji pojedynczego sprężysto-plastycznego kryształu z wieloma systemami poślizgu.

Przyrostowe warunki zgodności oraz zbiór \mathcal{A} systemów aktywnych.	
$\dot{f}^K \leq 0, \quad \dot{f}^K \dot{\gamma}^K = 0 \quad \text{dla} \quad K \in \mathcal{P} = \{L : f^L = 0\} \supseteq \mathcal{A} = \{L : \dot{\gamma}^L > 0\}$	
Pochodne naprężenia τ i funkcji plastyczności f^K oraz gradient prędkości \mathbf{d} .	
$\overset{\nabla}{\tau} = \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{d} - \sum_{K=1}^{n_S} \lambda^{PK} \dot{\gamma}^K$	$\mathbf{d} = \bar{\mathbb{L}}^{*-1} \cdot \overset{\nabla}{\tau} + \sum_{K=1}^{n_S} \mu^{PK} \dot{\gamma}^K$
$\dot{f}^K = \lambda^K \cdot \mathbf{d} - \sum_{L=1}^{n_S} g^{KL} \dot{\gamma}^L$	$\dot{f}^K = \mu^K \cdot \overset{\nabla}{\tau} - \sum_{L=1}^{n_S} h^{KL} \dot{\gamma}^L$
Normalne do powierzchni plastyczności $\lambda^K = \lambda^{PK}$ i $\mu^K = \mu^{PK}$.	
$\lambda^K = \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*K} + \beta^{*K}$	$\lambda^K = \mathbb{L}^* \cdot \mu^K \quad \mu^K = \mathbf{p}^{*K} + \bar{\mathbb{L}}^{*-1} \cdot \beta^{*K}$
$\mu^K \cdot \lambda^L = \lambda^K \cdot \mu^L$	
Macierz modułów interakcji g^{KL} i efektywnych modułów wzmocnienia h^{KL} .	
$g^{KL} = h^{*KL} + \lambda^K \cdot \mathbf{p}^{*L} = h^{*KL} + \mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*L} + \beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}$	
$h^{KL} = g^{KL} - \mu^K \cdot \lambda^L$	
$h^{KL} = h^{*KL} - \mu^K \cdot \beta^{*L} = h^{*KL} - \beta^{*K} \cdot \bar{\mathbb{L}}^{*-1} \cdot \beta^{*L} - \mathbf{p}^{*K} \cdot \beta^{*L}$	

Korzystając z (2.40), (2.42) i (2.14a), wzór na zmianę wartości funkcji plastyczności $\dot{f}^K = \dot{\tau}^K - \dot{\tau}_{cr}^K$ łatwo przedstawić w postaci

$$\dot{f}^K = \lambda^K \cdot \mathbf{d} - \sum_{L=1}^{n_S} g^{KL} \dot{\gamma}^L, \quad (2.43)$$

¹Hill (1966) dla symbolu h^{*KL} stosuje określenie ang. *instantaneous moduli*, natomiast praca (Havner & Shalaby, 1977) zawiera stwierdzenie, że *fizyczne moduły wzmocnienia systemów poślizgu* (ang. *physical slip-systems hardening moduli*) to parametry materialne łączące przyrosty krytycznych naprężeń ścinających z przyrostami ścinania systemów w postaci związku (2.42). Z kolei Asaro (1983b) dla tych modułów stosuje inny termin ang. *instantaneous slip plane hardening rate*, a w pracy (Asaro, 1983a): ang. *slip-plane hardening rate*. Natomiast Wu et al. (1991) i Bassani (1994), dla tych samych modułów h^{*KL} , używają terminu *chwilowe moduły wzmocnienia* (ang. *instantaneous hardening moduli*). Havner & Shalaby (1977) dla wielkości h^{KL} występujących w równaniu na \dot{f}^K (por. tab. 2.3) stosują termin *efektywne moduły wzmocnienia systemów poślizgu* (ang. *effective slip-system hardening moduli*).

gdzie moduły interakcji systemów poślizgu plastycznego są wyznaczone jako

$$g^{KL} = h^{*KL} + \lambda^K \cdot \mathbf{p}^{*L}. \quad (2.44)$$

Należy w tym miejscu zauważyć, że jeśli macierz chwilowych modułów wzmocnienia h^{*KL} jest symetryczna to macierz modułów interakcji g^{KL} (2.44) nie jest symetryczna, por. tab. 2.3.

Tabela 2.3 zawiera podsumowanie najważniejszych związków konstytutywnych modelu deformacji z wieloma systemami poślizgu w sprężysto-plastycznym kryształ.

2.6 Przyrostowe związki konstytutywne wyrażone w miarach niesymetrycznych

Przedstawione w podrozdziale 2.5 powyżej, klasyczne sformułowanie skończonych deformacji pojedynczego kryształu, (Hill, 1966), (Hill & Rice, 1972), (Asaro, 1983b), bazuje na (obiektywnych) związkach konstytutywnych wykorzystujących parę zmiennych prędkościowych $(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{d})$, odpowiednio, pochodną Zaremby–Jaumanna naprężenia Kirchhoffa i eulerowską prędkość odkształcenia. W celu (późniejszego) skonstruowania algorytmu minimalizacji energii przyrostowej (rozdział 4.3) wygodne jest podanie równań konstytutywnych łączących miary niesymetryczne $(\dot{\mathbf{S}}, \dot{\mathbf{F}})$, czyli odpowiednio, pochodne pierwszego tensora naprężenia Pioli-Kirchhoffa i tensora gradientu deformacji, por. (Hill, 1978), (Petryk, 2000a).

Przyjęty model to materiał prosty z parametrami wewnętrznymi, tzn. taki, że stan naprężenia zależy, w danej chwili i w zadanej temperaturze, od deformacji (np. od \mathbf{F}) i parametrów wewnętrznych, ale nie zależy od kolejnych wyższych gradientów deformacji.

Równania dla prędkości zmian naprężenia i funkcji plastyczności wyrażone w miarach niesymetrycznych można przedstawić w postaci

$$\dot{\mathbf{S}} = \mathbb{A} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \sum_{L=1}^{n_S} \Lambda^{PL} \overset{\circ}{\gamma}^L, \quad (2.45)$$

$$\dot{f}^K = \Lambda^K \cdot \dot{\mathbf{F}} - \sum_{L=1}^{n_S} g^{KL} \overset{\circ}{\gamma}^L. \quad (2.46)$$

Wymienione powyżej tensorowe miary naprężenia można przedstawić w relacjach $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{S} \mathbf{F}^T = \mathbf{F} \mathbf{N}$, gdzie \mathbf{N} oznacza niesymetryczny tensor naprężeń nominalnych równy transpozycji pierwszego tensora Pioli-Kirchhoffa, czyli $\mathbf{N} = \mathbf{S}^T$. Dla prędkości (pochodne materialne) niesymetrycznych miar odkształcenia i naprężenia zachodzą równości

$$\dot{\mathbf{F}} = (\mathbf{d} + \boldsymbol{\omega}) \mathbf{F} \quad \text{oraz} \quad \dot{\mathbf{S}} = (\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}} + \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau} \mathbf{d}) \overset{-T}{\mathbf{F}}. \quad (2.47)$$

Pochodna materialna $\dot{\mathbf{F}}$ gradientu deformacji zawiera i następnie wprowadza do równań spin materialny (tensor $\boldsymbol{\omega}$ chwilowej prędkości obrotowej). Tensor \mathbb{A} o walencji 4 jest nazywany pierwszym tensorem sprężystości, a jego postać w związku (2.45a) jest wyznaczona przy założeniu hipersprężystości materiału. Wówczas składowe tensora \mathbb{A} są wyznaczone w postaci pochodnych gęstości energii odkształceń sprężystych

$A_{iJkL} = \frac{\partial \bar{w}}{\partial F_{i,J} \partial F_{kL}}$. Tensory kierunkowe $\mathbf{\Lambda}^{PL}$ wyznaczają niesprężystą część zmiany naprężenia, natomiast tensory $\mathbf{\Lambda}^L$ określają normalne do powierzchni plastyczności w przestrzeni gradientu deformacji \mathbf{F} . Symbole $\overset{\circ}{\gamma}^K$ i g^{KL} oznaczają odpowiednio, prędkości poślizgów plastycznych i moduły interakcji mechanizmów plastycznej deformacji.

Z wykorzystaniem relacji między pochodnymi materialnymi miar niesymetrycznych $(\dot{\mathbf{S}}, \dot{\mathbf{F}})$, a parą miar symetrycznych $(\overset{\nabla}{\boldsymbol{\tau}}, \mathbf{d})$ można wyznaczyć (zakładając, że wartości $\overset{\circ}{\gamma}^L$ i f^K na jednostkę masy, pozostają niezależne od przyjętych miar, (Petryk, 2000a)) wzory dla tensorów kierunkowych

$$\mathbf{\Lambda}^K = \lambda^K \mathbf{F}^{-T} = \mathbf{\Lambda}^{PK}, \quad (2.48)$$

ortogonalnych do powierzchni plastyczności f^K w przestrzeni \mathbf{F} . Stowarzyszoną prawą plastycznego płynięcia manifestuje się tu w postaci równości $\mathbf{\Lambda}^K = \mathbf{\Lambda}^{PK}$. Analogicznie można wyznaczyć składowe pierwszego tensora modułów sprężystości \mathbb{A} w polibazie $\mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_J \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_L$

$$\mathcal{A}_{iJkL} = \overset{-1}{F}_{Jj} \left(L_{ijkl}^* - \frac{1}{2} (\tau_{kj} \delta_{li} + \tau_{ik} \delta_{lj} + \tau_{il} \delta_{jk} - \tau_{lj} \delta_{ik}) \right) \overset{-1}{F}_{Ll}, \quad (2.49)$$

które zależą od modułów sprężystości L_{ijkl}^* występujących w klasycznym związku konstytutywnym oraz aktualnego stanu odkształcenia i naprężenia. Powyższy związek można uprościć, podstawiając w miejsce składowych L_{ijkl}^* tensora sprężystości wzór (2.31) zawierający składowe c_{ijkl} (2.28) przestrzennego tensora sprężystości,

$$\mathcal{A}_{iJkL} = \overset{-1}{F}_{Jj} (c_{ijkl} + \tau_{lj} \delta_{ik}) \overset{-1}{F}_{Ll}. \quad (2.50)$$

Powyżej widoczna jest symetria składowych względem par indeksów, czyli $\mathcal{A}_{iJkL} = \mathcal{A}_{kLiJ}$, natomiast jest brak symetrii wewnątrz par indeksów.

2.7 Prawa wzmocnienia

Wzmocnienie materiału jest obserwowane, gdy konieczne staje się przyłożenie dodatkowego naprężenia (ponad chwilową granicę plastyczności), tak aby mógł postępować dalszy proces deformacji plastycznej. Proces wzmocnienia występujący w plastycznie odkształcanych kryształach można modelować przy użyciu przyrostowo liniowego związku (2.42), por. (Hill, 1966), (Mandel, 1965), nazywanego prawem wzmocnienia (ang. the hardening rule). Prędkość $\dot{\tau}_{cr}^K$ krytycznego naprężenia ścinającego K -tego systemu poślizgu jest określana jako prędkość krytycznego oporu poślizgu. Chwilowe moduły wzmocnienia h^{*KL} w ogólności zależą od historii całkowitej deformacji. Początkowa wartość krytycznego lub progowego wypadkowego naprężenia ścinającego $\tau_{cr}^K(0)$, dla dobrze wyżarzonych kryształów typu r.s.c., jest przyjmowana jako równa $\tau_{cr}^K(0) = \tau_0$ dla wszystkich n_s systemów poślizgu. Związek (2.42) umożliwia modelowanie anizotropowego wpływu każdego z poślizgów na wzmocnienie wszystkich systemów, zarówno aktywnych (elementy diagonalne h^{*KK} określają własne wzmocnienie systemów aktywnych) jak i tych nieaktywnych (elementy poza diagonalą $h^{*K \neq L}$ określają umocnienie utajone systemów nieaktywnych).

Chwilowe moduły wzmocnienia h^{*KL} stanowią sumę tzw. fizycznych modułów wzmocnienia \mathcal{H}^{KL} oraz dodatkowych członów geometrycznych wynikających z przyjętego sposobu symetryzacji związków konstytutywnych. Przegląd znanych metod symetryzacji

znajduje się w punkcie 2.8, natomiast nowa propozycja selektywnej symetryzacji w podrozdziale 3.1. Zazwyczaj przyjmowane jest założenie, że fizyczne moduły wzmocnienia są symetryczne, tzn. $\mathcal{K}^{KL} = \mathcal{K}^{LK}$. Fizyczne moduły wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} to składowe macierzy fizycznych modułów wzmocnienia kryształu $[\mathcal{K}^{KL}]$. W ogólnym przypadku podczas plastycznej deformacji ścinanie w kryształach może jednocześnie zachodzić na kilku różnych systemach; jest to tzw. poślizg wielokrotny. W trakcie deformacji może wystąpić odciążenie systemów, wówczas ścinanie na wybranym kierunku zatrzymuje się, a następnie może wystąpić zwrot ścinania na przeciwny. W celu modelowania efektu zmiany zwrotu ścinania na danym kierunku poślizgu każdego z systemów z osobna, liczba systemów kryształu r.s.c. została podwojona z 12 do $n_s = 24$, por. wstęp podrozdziału 2.1. Wówczas, nieujemne prędkości ścinania $\dot{\gamma}^K$ na systemach poślizgu są w modelowaniu traktowane jako niezależne. W takim podejściu można łatwo uchwycić efekt Bauschingera oraz modelować obciążenie cykliczne. W przypadku, gdy zostaną uwzględnione przeciwne zwroty na kierunkach poślizgu macierz wzmocnienia kryształu o sieci typu r.s.c. jest o wymiarze (24×24) . Wszędzie tam, gdzie jest to możliwe, dla wygody przedstawiania i zwięzłości zapisu, będzie zamieszczana jedynie część macierzy wzmocnienia o wymiarach (12×12) , która odpowiada za opis wzmocnienia przy ścinaniu bez odciążania systemów.

W pracy (Taylor, 1938a) przedstawiono propozycję modelowania wzmocnienia w kryształach, gdzie wszystkie systemy poślizgu, zarówno te aktualnie aktywne jak i nieaktywne, podlegają wzmocnieniu z identyczną prędkością. Taki rodzaj modelowania jest obecnie nazywany *wzmocnieniem Taylora* lub *wzmocnieniem izotropowym*. Wówczas, w każdej chwili procesu deformacji wszystkie składowe fizycznej macierzy wzmocnienia przyjmują identyczne wartości

$$\mathcal{K}^{KL} = h. \quad (2.51)$$

Taka postać modułów wzmocnienia wyklucza możliwości modelowania szybszego utajonego wzmocnienia na systemach nieaktywnych.

Koiter (1953) zaproponował prawo *niezależnego wzmocnienia systemów* poślizgu w postaci

$$\mathcal{K}^{KL} = h \delta^{KL}, \quad (2.52)$$

gdzie składowe \mathcal{K}^{KL} tworzą diagonalną postać macierzy fizycznych modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} . Wówczas, tylko aktualnie aktywne systemy podlegają wzmocnieniu, a płynięcie dowolnego z systemów nie wpływa na wzmocnienie pozostałych, aktywnych bądź nieaktywnych systemów.

Kolejna z propozycji to *kinematyczne prawo wzmocnienia* zaproponowane w pracy (Budiansky & Wu, 1962) w postaci

$$\mathcal{K}^{KL} = h \mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}. \quad (2.53)$$

Symetryczny człon $\mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} = \mathbf{p}^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K}$ wprowadza niewielkie wzmocnienie utajone. W pracy (Khan & Cheng, 1996) można znaleźć kilka powszechnie stosowanych propozycji modułów wzmocnienia m.in. prawo kinematyczne proponowane w (Budiansky & Wu, 1962), jednak w nieco zmienionej postaci

$$\mathcal{K}^{KL} = h_{b0} + h_{b1} \mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}, \quad (2.54)$$

gdzie h_{b0} i h_{b1} są funkcjami naprężenia lub plastycznej deformacji. Pełne nasunięcie symetrycznych tensorów $\mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}$ można przekształcić tak, aby ujawnić kosinusy kątów

θ^{KL} między parami wektorów kierunków ścinania, $\cos \theta^{KL} = \mathbf{m}^{*K} \cdot \mathbf{m}^{*L}$, kosinusy kątów ϕ^{KL} między parami wektorów płaszczyzn ścinania, $\cos \phi^{KL} = \mathbf{n}^{*K} \cdot \mathbf{n}^{*L}$, oraz iloczyny skalarne par wektorów \mathbf{m}^{*K} i \mathbf{n}^{*L} ,

$$\mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} = \frac{1}{2} (\cos \theta^{KL} \cos \phi^{KL} + (\mathbf{n}^{*K} \cdot \mathbf{m}^{*L})(\mathbf{m}^{*K} \cdot \mathbf{n}^{*L})). \quad (2.55)$$

Należy zauważyć, że macierz utworzona z kosinusów kątów między wersorami \mathbf{m}^{*K} i \mathbf{n}^{*L} jest niesymetryczna.

Znana jest również inna propozycja *kinematycznego prawa wzmocnienia*, por. (Weng, 1979), w postaci

$$\mathcal{H}^{KL} = q h_w + (1 - q) h_w \cos \theta^{KL} \cos \phi^{KL}, \quad (2.56)$$

gdzie h_w zależy od naprężenia lub plastycznej deformacji, parametr q będzie wyjaśniony poniżej, por. 2.58. Natomiast kolejny model zaproponowany w pracy (Weng, 1987) może być zastosowany w modelowaniu wzmocnienia izotropowego, kinematycznego, wzmocnienia izotropowo-kinematycznego, efektu Bauschingera oraz wzmocnienia utajonego

$$\mathcal{H}^{KL} = h^L (\alpha_1 + (1 - \alpha_1) \cos \theta^{KL} \cos \phi^{KL} + \alpha_2 \sin \theta^{KL} + \alpha_3 \sin \phi^{KL}). \quad (2.57)$$

Stałe α_1 , α_2 , α_3 określają stopień anizotropii wzmocnienia.

Kolejny model wzmocnienia kryształu (2.58) jest w formie fizycznych modułów wzmocnienia zależnych od dwóch parametrów, powszechnie oznaczanych jako (h, q) . Taka dwuparametrowa forma pozwala na uwzględnienie w modelowaniu deformacji plastycznej szybszego utajonego wzmocnienia (identycznego dla wszystkich) nieaktywnych systemów poślizgu. Jako pierwszy Hutchinson (1970) wprowadził propozycję zapisu modułów wzmocnienia umożliwiającą opis takich efektów w postaci dwuparametrowej $\mathcal{H}^{KL} = h_m + (h_s - h_m) \delta^{KL}$. Następnie, w pracach (Asaro, 1979) oraz (Peirce et al., 1982) przedstawiono fizyczne moduły wzmocnienia w formie związku

$$\mathcal{H}^{KL}(\gamma) = h(\gamma) (q + (1 - q) \delta^{KL}), \quad (2.58)$$

nazywanego prostym prawem utajonego wzmocnienia i stosowanego obecnie w wielu pracach m.in. w (Asaro, 1983a), (Peirce et al., 1983), (Cuitiño & Ortiz, 1992), (Bassani, 1994), (Fu et al., 2004). Powyżej występujący symbol γ jest wyznaczany jako

$$\gamma = \sum_{K=1}^{n_S} \gamma^K, \quad \text{gdzie} \quad \gamma^K = \int_0^t \overset{\circ}{\gamma}^K d\tau. \quad (2.59)$$

Monotonicznie rosnący parametr γ oznacza całkowity zakumulowany poślizg, otrzymywany w postaci sumy poślizgów na wszystkich systemach, także na tych które w procesie deformacji były aktywne i zostały zatrzymane. Symbol $h(\gamma)$ oznacza, zależny od historii plastycznej części deformacji, parametr określający prędkość samoumocnienia (ang. the single slip self-hardening rate). W przypadku, gdy poślizg zachodzi na pojedynczym systemie, parametr $h(\gamma)$ wyznacza prędkość wzmocnienia na aktywnym systemie poślizgu. Iloczyn $h(\gamma)q$, znajdujący się poza diagonalą macierzy fizycznych modułów wzmocnienia (2.58), określa prędkości wzmocnienia utajonego (ang. the latent hardening rate) systemów nieaktywnych. Wówczas symbol q nazywany parametrem wzmocnienia utajonego

systemów nieaktywnych jest równy stosunkowi prędkości wzmocnienia utajonego do samowzmocnienia systemów aktywnych. Często w modelowaniu zwykło się przyjmować stałą wartość parametru q , mimo że obserwacje eksperymentalne wykazują nieliniowy przebieg wartości q w trakcie procesu deformacji, por. (Franciosi et al., 1980). Na podstawie eksperymentów (dotyczących kryształów metali o sieci typu r.s.c.), por. (Kocks, 1970), określono wartości stałej q leżące w przedziale $1 \leq q \leq 1.4$. Z tych eksperymentów wynika wniosek, że moduły poza diagonalą macierzy wzmocnienia spełniają nierówność $h(\gamma)q \geq h(\gamma)$.

Powyższa nierówność wynika z pomiarów wartości wzmocnienia utajonego podczas doświadczalnych eksperymentów (ang. latent hardening test) zaprojektowanych w celu wyznaczenia przebiegu wartości parametru q . Test wzmocnienia utajonego, (Kocks, 1964), (Franciosi et al., 1980), (Bassani & Wu, 1991), (Wu et al., 1991), jest wykorzystywany do badania charakteru wzmocnienia pojedynczego kryształu. Metoda pomiaru wartości parametru q polega na początkowym obciążeniu kryształu o orientacji dającej aktywację pojedynczego, pierwotnego systemu (ang. primary test). Monokryształ jest odciążany i następnie cięty na mniejsze próbki, które są ponownie obciążane tak, aby aktywować inny poprzednio niepłynący system nazywany wtórnym system poślizgu (ang. secondary test). W obydwu orientacjach mierzone są wartości krytycznego naprężenia ścinającego systemu pierwotnego i wtórnego. W celu wyznaczenia wartości parametru wzmocnienia utajonego q należy ustalić stosunek wartości krytycznego naprężenia ścinającego wyznaczonego przy ścinaniu na wtórnym systemie do wartości krytycznego naprężenia wyznaczonego przy ścinaniu na systemie pierwotnym, (Franciosi et al., 1980), (Franciosi, 1985), (Wu et al., 1991). Wraz ze wzrostem odkształcenia wartość parametru wzmocnienia utajonego przechodzi przez początkowe maksimum, następnie stopniowo spada do osiągnięcia prawie stałej wartości.

Alternatywna pośrednia metoda wyznaczenia wartości parametru wzmocnienia utajonego q polega na pomiarze kąta „przestrzelenia” (ang. overshoot) linii symetrii między trójkątami podstawowymi (rys. 2.3) rzutu stereograficznego w teście rozciągania jednoosiowego.

W szczególnym przypadku, gdy parametr wzmocnienia $q = 1$ to podczas deformacji, wszystkie systemy ulegają wzmocnieniu z jednakową prędkością. Wówczas macierz fizycznych modułów wzmocnienia $[\mathcal{K}^{KL}]$ (2.58) opisuje wzmocnienie typu Taylora (2.51). W przypadku, gdy parametr wzmocnienia przyjmuje wartość $q = 0$ to macierz wzmocnienia kryształu $[\mathcal{K}^{KL}]$ opisuje wzmocnienie typu Koitera (2.52). W pozostałych przypadkach, tzn. gdy parametr wzmocnienia $q > 1$, płynięcie dowolnego z systemów z osobna lub kilku jednocześnie, wpływa na szybsze wzmocnienie pozostałych nieaktywnych systemów poślizgu.

W modelowaniu wzmocnienia w kryształach można stosować rozróżnienie wzmocnienia na współpłaszczyznowych (ang. coplanar systems) i niewspółpłaszczyznowych systemach poślizgu (ang. non-coplanar systems). Współpłaszczyznowe, to te z pośród systemów, które posiadają wspólną płaszczyznę poślizgu (o jednakowym wektorze normalnym \mathbf{n}). Zgodnie z stosowanymi tu oznaczeniami systemów (tab. 2.1), przyjętymi zgodnie z pracą (Taylor, 1938b), można wyróżnić cztery grupy systemów współpłaszczyznowych, odpowiednio względem płaszczyzn a , b , c i d , czyli systemy $(a1, a2, a3, a\bar{1}, a\bar{2}, a\bar{3})$, $(b1, b2, b3, b\bar{1}, b\bar{2}, b\bar{3})$, $(c1, c2, c3, c\bar{1}, c\bar{2}, c\bar{3})$ i $(d1, d2, d3, d\bar{1}, d\bar{2}, d\bar{3})$. W literaturze można znaleźć propozycję modelowania wzmocnienia przy przyjęciu parametru wzmocnienia

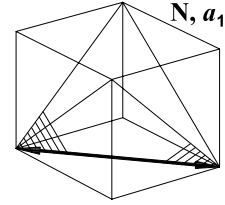
$q = 1$ dla systemów współpłaszczyznowych, por. (Asaro & Needleman, 1985); wówczas macierz fizycznych modułów dla 12 systemów przyjmuje formę blokową

$$[\mathcal{K}^{KL}] = h(\gamma) \begin{bmatrix} \mathbf{A} & q\mathbf{A} & q\mathbf{A} & q\mathbf{A} \\ q\mathbf{A} & \mathbf{A} & q\mathbf{A} & q\mathbf{A} \\ q\mathbf{A} & q\mathbf{A} & \mathbf{A} & q\mathbf{A} \\ q\mathbf{A} & q\mathbf{A} & q\mathbf{A} & \mathbf{A} \end{bmatrix}. \quad (2.60)$$

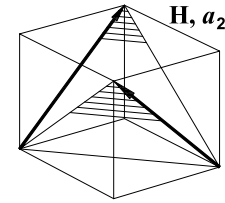
Każdy z bloków macierzy $[\mathcal{K}^{KL}]$ zawiera podmacierz \mathbf{A} o wymiarze (3×3) całkowicie wypełnioną jedynkami. Macierz $\mathbf{A} = [A^{ij}]$ ma składowe $A^{ij} = 1$, gdzie indeksy $i, j = 1, 2, 3$. W przypadku pojedynczego poślizgu, prędkość wzmocnienia pozostałych systemów współpłaszczyznowych jest równa prędkości wzmocnienia na systemie aktywnym. Nieaktywne systemy, niewspółpłaszczyznowe z danym aktywnym, są wzmocniane szybciej od nieaktywnych systemów współpłaszczyznowych.

W pracy (Franciosi & Zaoui, 1982a) jest propozycja opisu modelowania utajonego wzmocnienia z rozróżnieniem ze względu na charakter wzajemnego oddziaływania par systemów poślizgu. Dwa dowolne systemy poślizgu K i L mogą być:

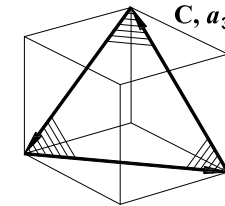
współliniowe, gdzie aktualny wypadkowy wektor Burgersa \mathbf{c}_L jest równoległy do wektorów obydwu systemów (ang. no junction, colinear). Identyczne kierunki poślizgu systemów,



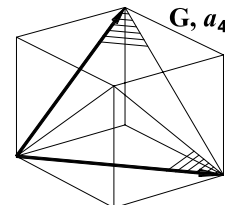
ortogonalne, wypadkowy wektor Burgersa nie jest energetycznie dopuszczalny (ang. Hirth lock, critical). Ortogonalne kierunki poślizgu systemów,



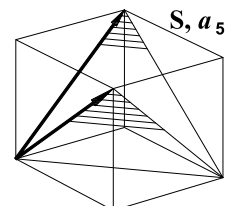
współpłaszczyznowe, wypadkowy wektor Burgersa leży na tej samej płaszczyźnie poślizgu co początkowe wektory (ang. coplanar). Identyczna płaszczyzna poślizgu systemów,



poprzeczne, wypadkowy wektor Burgersa jest energetycznie dopuszczalny i leży na jednej z dwóch płaszczyzn poślizgu (ang. Glissile junction, cross-slip),



barierą typu Lomera, wypadkowy wektor Burgersa jest energetycznie dopuszczalny ale nie leży na żadnej z dwóch płaszczyzn poślizgu (ang. Lomer-Cottrell sessile lock).



Charakter wzajemnego oddziaływania systemu $(\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K)$ z systemem $(\mathbf{n}^J, \mathbf{m}^J)$ można

Prędkość samoumocnienia $h(\gamma)$ wg pracy (Peirce et al., 1982) można przedstawić w postaci nieliniowej funkcji o wysyceniowym charakterze

$$h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2\left(\frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0}\right). \quad (2.62)$$

Powyższa funkcja jest wyznaczana jako pochodna krytycznego naprężenia ścinającego $h(\gamma) = \frac{d\tau_{\text{cr}}(\gamma)}{d\gamma}$ danego w postaci funkcji trygonometrycznej

$$\tau_{\text{cr}}(\gamma) = \tau_0 + (\tau_s - \tau_0) \tanh\left(\frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0}\right), \quad (2.63)$$

gdzie h_0 to początkowa wartość modułu określającego prędkość wzmocnienia (samoumocnienia systemu aktywnego), τ_0 jest początkową wartością oporu płynięcia (granica plastyczności), τ_s oznacza wartość, przy której następuje wysycenie krytycznego naprężenia ścinania (ang. the saturation flow resistance), γ to zakumulowane odkształcenie ścinania na wszystkich systemach poślizgu, por. (2.59). Występująca we wzorze (2.62) powyżej funkcja $\operatorname{sech}(x) = 1/\cosh(x)$ to secans hiperboliczny. Powyższa funkcja prowadzi do modelowania z szybko zanikającym wzmocnieniem, więc jest odpowiednia w modelowaniu wzmocnienia kryształów stopów metali, np. Al-Cu.

W pracy (Peirce et al., 1982) można znaleźć wzór określający potęgowy charakter prędkości samoumocnienia $h(\gamma)$, przewidziany do zastosowania w modelowaniu kryształów czystych metali

$$h(\gamma) = h_0 \left(\frac{h_0 \gamma}{n \tau_0} + 1\right)^{n-1}, \quad (2.64)$$

gdzie symbol n ma stałą wartość. Powyższy związek wynika z przyjętej potęgowej funkcji określającej zmianę wartości krytycznego naprężenia ścinającego w postaci

$$\tau_{\text{cr}}(\gamma) = \tau_0 \left(\frac{h_0 \gamma}{n \tau_0} + 1\right)^n. \quad (2.65)$$

Powyższe funkcje można obecnie odnaleźć w wielu pracach, m.in. w (Han et al., 2005), (Kuroda & Tvergaard, 1999).

Natomiast w pracy (Fortunier & Driver, 1987) można znaleźć potęgowe prawo wzmocnienia w postaci

$$\tau_{\text{cr}}(\gamma) = \tau_0 (1 + k \gamma^n), \quad (2.66)$$

gdzie k oznacza parametr wzmocnienia, n to stały wykładnik, $\tau_0 = \tau_{\text{cr}}(0)$ (przy zerowym ścinaniu γ^K) jest krytycznym wypadkowym naprężeniem ścinającym wymaganym do zainicjalizowania skończonego plastycznego płynięcia. Autorzy ograniczają dyskusję do wzmocnienia izotropowego i zastępują składowe \mathcal{H}^{KL} anizotropowej fizycznej macierzy wzmocnienia jednym współczynnikiem wzmocnienia h (ang. hardening coefficient). Współczynnik $h = d\tau_{\text{cr}}(\gamma)/d\gamma$ określa kąt nachylenia modelowanej krzywej naprężenie-odkształcenie pojedynczego kryształu w postaci

$$h(\gamma) = \tau_0 n k \gamma^{(n-1)}. \quad (2.67)$$

W pracy (Wu et al., 1996) można znaleźć funkcję współczynnika wzmocnienia w postaci eksponencjalnej

$$h(\gamma) = \frac{\tau_s - \tau_0}{\gamma_0} \exp\left(\frac{\gamma}{\gamma_0}\right) \quad (2.68)$$

oraz propozycje przyjmowania niesymetrycznych fizycznych macierzy modułów wzmocnienia w postaci

$$h^{KL}(\gamma) = q^{KL} h^L(\gamma) \quad (\text{nie ma sumowania po } L), \quad (2.69)$$

gdzie składowe q^{KL} są symetryczne, o stałych wartościach i określają wzmocnienie utajone systemów nieaktywnych, np. w formie (2.60). Moduły $h^L(\gamma)$ wyznaczają samowzmocnienie każdego z systemów poślizgu L niezależnie i są funkcjami aktualnej deformacji. Opis samowzmocnienia zaproponowany w pracy (Brown et al., 1989) jest w postaci prawa potęgowego

$$h^L = h_0 \left(1 - \frac{\tau_{cr}^L}{\tau_s}\right)^a, \quad (2.70)$$

gdzie każda z prędkości samowzmocnienia $h^L(\gamma)$ systemów zależy od aktualnej wartości krytycznego naprężenia ścinającego τ_{cr}^L danego systemu poślizgu. Stałe h_0 , τ_s , a są przyjęte jako identyczne dla wszystkich n_s systemów poślizgu.

Wielu autorów rozważało wpływ wzajemnego oddziaływania dyslokacji poruszających się na różnych systemach na proces wzmocnienia kryształów, por. (Kocks, 1964), (Basiński & Basiński, 1979), (Franciosi et al., 1980). Zaobserwowano, że na wykresie krzywej naprężenia (wypadkowego naprężenia ścinającego) w teście jednoosiowego rozciągania kryształu o orientacji wewnątrz trójkąta podstawowego można wyróżnić trzy etapy deformacji. Na krzywej naprężenia można zaobserwować pierwszy etap (I) łatwego poślizgu, drugi etap (II) silnego liniowego wzmocnienia i trzeci etap (III) wzmocnienia parabolicznego. Wyjaśnieniem tak wyraźnych różnic w odpowiedzi materiału podczas deformacji może być charakter zmieniających się struktur dyslokacyjnych, por. (Basiński & Basiński, 1979).

(I). Na etapie *łatwego poślizgu* występuje duże odkształcenie materiału przy jednoczesnym małym wzmocnieniu liniowym. Dominują pierwotne (ang. primary), przeważnie krawędziowe, dyslokacje leżące w wydłużonych regionach o małej gęstości dyslokacji. Gęstość wtórnych (ang. secondary) dyslokacji (las dyslokacji) jest około rzędu wielkości mniejsza od gęstości dyslokacji pierwotnych. Długość etapu (I) zależy od początkowej orientacji kryształu, gdyż kończy się wraz z pojawieniem dodatkowych (wtórnych) systemów poślizgu. Występujące niewielkie wzmocnienie jest spowodowane nakładaniem się pól naprężeń pierwotnych dyslokacji poruszających się na równoległych płaszczyznach oraz spiętrzeniami (ang. pile-up) dyslokacji występującymi na (niewielu) płaszczyznach.

(II). Etap silnego *liniowego wzmocnienia* jest związany z aktywacją wtórnych systemów, co z kolei powoduje, że dyslokacyjna struktura staje się bardziej izotropowa, tzn. gęstości dyslokacji wtórnych i pierwotnych zrównują się. Występuje wzajemne blokowanie ruchu dyslokacji płynących na innych systemach poślizgu.

(III). Na etapie *parabolicznego wzmocnienia* pojawiają się (termicznie aktywowane) poślizgi poprzeczne dyslokacji śrubowych, co umożliwia omijanie przeszkód i w efekcie zmniejszanie wzmocnienia.

Etap łatwego poślizgu nie jest obserwowany w przypadku płynięcia polikryształów oraz kryształów zorientowanych tak, że od początku deformacji zachodzi poślizg wielokrotny, por. punkt 6.1.5.

W pracy (Bassani & Wu, 1991) można znaleźć propozycję modelowania wzmocnienia, które uwzględnia wpływ, powyżej przedstawionych, procesów tworzenia struktur dyslokacyjnych w kryształach.

Natomiast w pracy (Wu et al., 1991) zostały pokazane pewne nierównościowe ograniczenia, które powinny, zdaniem autorów, być spełnione przez chwilowe moduły wzmocnienia. Tych wymagań nie spełniają prawa wzmocnienia przedstawione powyżej, gdzie wartości fizycznych modułów \mathcal{H}^{KL} zależą od całkowitego zakumulowanego poślizgu (a nie od poślizgu na każdym systemie z osobna).

W celu opisanego zjawiska złożonego wielokrotnego poślizgu Bassani & Wu (1991) proponują moduły wzmocnienia \mathcal{H}^{KK} , które są funkcjami poślizgów γ^K . Elementy na diagonalu macierzy $[\mathcal{H}^{KK}]$, przyjmują formę iloczynu $F^K G^K$ (nie ma sumowania po indeksie K), odpowiednio, członów samoumocnienia i wzajemnego oddziaływania systemów,

$$\mathcal{H}^{KK} = F(\gamma^K) G(\{\gamma^L; L = 1, \dots, n_s, L \neq K\}). \quad (2.71)$$

Symbol $F^K = F(\gamma^K)$ powyżej oznacza człon określający samoumocnienie w wyniku poślizgu pojedynczego systemu K . Człon G określa wzmocnienie utajone powstające w wyniku wzajemnych oddziaływań wszystkich systemów, z pominięciem wpływu systemu K na jego umocnienie, tak że $G^K = G(\{\gamma^L = 0; L = 1, \dots, n_s; L \neq K\}) = 1$. Elementy poza diagonalną macierzy fizycznych modułów można przyjąć w postaci niesymetrycznej

$$\mathcal{H}^{KL} = q_\epsilon \mathcal{H}^{LL}, \quad \text{dla } K \neq L \quad (2.72)$$

lub symetrycznej

$$\mathcal{H}^{KL} = q_\epsilon (\mathcal{H}^{KK} + \mathcal{H}^{LL}), \quad \text{dla } K \neq L. \quad (2.73)$$

Działanie, powyżej przedstawionego, prawa wzmocnienia złożonego z iloczynu dwóch funkcji można wyjaśnić na przykładzie jednoosiowego rozciągania. W etapie (I) deformacji, gdy płynie pojedynczy system poślizgu, funkcja $F(\gamma^L)$ charakteryzuje przebieg wzmocnienia w trakcie łatwego poślizgu, podczas gdy funkcja G ma stałą wartość 1. W trakcie etapu (II) deformacji, gdy dodatkowy system poślizgu został aktywowany, funkcja $G \neq 1$ opisuje efekt wzmocnienia spowodowanego lasem dyslokacji powstającym w wyniku interakcji między pierwotnymi i wtórnymi systemami poślizgu. W celu odróżnienia, wprowadzony został symbol q_ϵ dla parametru wzmocnienia, który niekoniecznie musi przyjmować wartości z przedziału $1 \div 1.4$. Autorzy podają, że otrzymują zgodność wyników eksperymentalnych i numerycznych, przy $q_\epsilon = 0$, czyli bez wpływu wzmocnienia utajonego, por. (Bassani & Wu, 1991).

Bassani & Wu (1991) proponują funkcję opisującą etap (I) deformacji w postaci związku o charakterze wysyceniowym

$$\text{dla } K: \quad F(\gamma^K) = (h_0 - h_s) \operatorname{sech}^2\left(\frac{(h_0 - h_s)\gamma^K}{\tau_I - \tau_0}\right) + h_s, \quad (2.74)$$

gdzie τ_0 oznacza początkową wartość krytycznego ścinającego naprężenia wypadkowego, τ_I to wartość krytyczna naprężenia wypadkowego etapu (I) deformacji (wartość na przełomie krzywej naprężenia przy rozciąganiu, gdzie zaczyna się duże plastyczne płynięcie

i rozpoczyna łatwy poślizg), h_0 to moduł wzmocnienia zaraz po uruchomieniu pływnięcia oraz $h_s = h_s^I$ to moduł wzmocnienia podczas etapu (I) łatwego poślizgu. Moduł wzmocnienia h_s może zmieniać się w trakcie deformacji, tak aby uwzględnić paraboliczne wzmocnienie w etapie (III) deformacji $h_s = h_s^{III}$, np. w postaci funkcji $h_s = h_s(\gamma)$ całkowitego poślizgu zakumulowanego, por. (2.76).

Funkcja G określa wzmocnienia etapu (II) deformacji, w wyniku wzajemnych oddziaływań płynących systemów (czyli lasu dyslokacji)

$$\text{dla } K: \quad G(\{\gamma^L \geq 0; L = 1, \dots, n_s, L \neq K\}) = 1 + \sum_{L \neq K} f^{KL} \tanh\left(\frac{\gamma^L}{\gamma^0}\right). \quad (2.75)$$

G przyjmuje wartość 1 wtedy, gdy żaden z systemów nie jest aktywny, natomiast dla dużych wartości poślizgów plastycznych dąży do skończonej wartości. Symbol γ^0 wyznacza wartość ścinania na dodatkowych systemach poślizgu, przy której wzmocnienie wynikające z wzajemnego oddziaływania systemów K i L osiąga największą wartość.

Występujące powyżej składowe f^{KL} reprezentują stałe wartości sił wzajemnych oddziaływań dyslokacji działających na różnych systemach (np. wzajemnie oddziaływanie systemów o wspólnej płaszczyźnie poślizgu jest słabsze od oddziaływań systemów niewspółpłaszczyznowych) wynikające z teorii dyslokacji, por. (Kocks, 1964), (Franciosi et al., 1980), (Franciosi & Zaoui, 1982a), (Bassani & Wu, 1991). Współczynniki f^{KL} są przyjmowane w postaci stałych oznaczonych symbolami a_i , $i = 1, \dots, 5$, a ich wartości zależą od charakteru wzajemnych geometrycznych relacji między parą systemów K i L , por. tab. 2.4. Geometryczne relacje dwóch płynących systemów przekładają się na charakter dyslokacyjnych blokad formowanych w wyniku wielokrotnych poślizgów. Z charakteru oddziaływania systemów wynikają nierówności $a_5 > a_4 > a_3 > a_2 > a_1$, natomiast w pracy (Bassani & Wu, 1991) można znaleźć wartości $a_1 = a_2 = a_3 = 8$, $a_4 = 15$, $a_5 = 20$. Wg pracy (Franciosi & Zaoui, 1982a), nie wymieniony powyżej współczynnik a_0 określa interakcje par dyslokacji należących do tego samego systemu poślizgu.

Moduł wzmocnienia h_s^I podczas etapu (I) łatwego poślizgu przyjmuje inne wartości niż podczas etapu (III), gdy odkształcenia plastyczne są względnie duże oraz efekty wzmocnienia wynikającego z oddziaływania systemów zostały wysyczone. W celu uwzględnienia zmiany wartości modułów wzmocnienia Bassani & Wu (1991) proponują przyjęcie funkcji zależnej od poślizgu zakumulowanego γ w postaci

$$h_s(\gamma) = h_s^I + (h_s^{III} - h_s^I) \tanh(\gamma/\gamma_0^{III}). \quad (2.76)$$

Symbol γ_0^{III} to przybliżona wartość zakumulowanego poślizgu na początku etapu (III) deformacji kryształu.

Natomiast w pracy (Kalidindi & Schoenfeld, 2000) znajduje się propozycja fizycznych modułów wzmocnienia będących modyfikacją związków zaproponowanych w (Bassani & Wu, 1991) (ang. Bassani-type hardening). Modyfikacja polega na wprowadzeniu potęgowego prawa określającego samowzmocnienie systemów aktywnych podczas etapu łatwego poślizgu w postaci

$$\mathcal{H}^{KK} = h_0' \left(1 - \frac{\tau_K}{\tau_s}\right)^a \left(1 + \sum_{L=1, L \neq K} f^{KL} \tanh\left(\frac{\gamma^L}{\gamma^0}\right)\right), \quad (2.77)$$

$$\mathcal{H}^{KL} = q_\epsilon (\mathcal{H}^{KK} + \mathcal{H}^{LL}), \quad \text{dla } K \neq L.$$

2.8 Symetryzacja związków konstytutywnych - dotychczasowe podejścia

Havner & Shalaby (1977) oraz Peirce et al. (1982) wskazują, że są wyraźne obliczeniowe korzyści, gdy w zagadnieniu przyrostowym zostanie wymuszona symetria macierzy stycznej. Symetria macierzy $[\mathcal{K}^{KL}]$ fizycznych modułów (punkt 2.7) na ogół powoduje brak symetrii macierzy modułów interakcji systemów poślizgu plastycznego $[g^{KL}]$ (2.44) oraz macierzy efektywnych modułów wzmocnienia $[h^{KL}]$ (tab. 2.3), a zatem brak symetrii macierzy stycznej zagadnienia przyrostowego plastyczności kryształów. Symetryczna postać macierzy modułów interakcji $[g^{KL}]$ prowadzi do symetrii macierzy stycznej zagadnienia przyrostowego i w takim przypadku związki konstytutywne mogą być przedstawione w formie wariacyjnej. Ta wariacyjna forma jest użyteczna w zagadnieniach analitycznych, np. pozwala odpowiedzieć na pytania o jednoznaczność i bifurkację rozwiązania w zagadnieniu brzegowym sformułowanym przez Hilla, (Hill, 1966), (Hill, 1978). Wariacyjne sformułowanie jest również wygodne numerycznie, gdyż prowadzi do symetrii globalnej macierzy sztywności w sformułowaniu metody elementów skończonych.

W pracy (Havner & Shalaby, 1977) można znaleźć propozycję (metoda określana w literaturze jako „*the simple theory*” będzie tu oznaczana skrótem H.S.) symetryzacji efektywnych modułów wzmocnienia h^{KL} oraz modułów interakcji systemów g^{KL} w postaci chwilowych modułów wzmocnienia

$$h^{*KL} = \mathcal{K}^{KL} + \mathbf{p}^{*K} \cdot \beta^{*L}, \quad (2.78)$$

przy założeniu, że macierz fizycznych modułów wzmocnienia $\mathcal{K}^{KL} = h$ jest symetryczna oraz izotropowa. Powyższa propozycja wprowadza jawną zależność chwilowych modułów h^{*KL} od stanu naprężenia poprzez człon zawierający β^{*L} (2.37). Przy użyciu wzoru (2.37) ostatni człon w (2.78) można przekształcić do spotykanej w literaturze postaci $\mathbf{p}^{*K} \cdot \beta^{*L} = -2 \operatorname{tr}(\mathbf{p}^{*K} \boldsymbol{\tau} \mathbf{w}^{*L})$. Ten dodatkowy człon zawiera również efekty geometryczne wynikające z obrotu sieci kryształu i osiąga duże wartości w porównaniu z fizycznymi modułami \mathcal{K}^{KL} przy skończeniu dużej deformacji. Toteż pełni dominującą rolę we wzmocnieniu (2.42), ale może również powodować osłabienie systemów poślizgu podczas dużych deformacji.

Peirce et al. (1982) proponują symetryzację w postaci (ang. „*the P.A.N. rule*”, w niniejszej rozprawie jest to metoda P.A.N.)

$$h^{*KL} = \mathcal{K}^{KL} + \frac{1}{2}(\mathbf{p}^{*K} \cdot \beta^{*L} - \mathbf{p}^{*L} \cdot \beta^{*K}). \quad (2.79)$$

Autorzy powyższego podejścia proponują użycie symetrycznych modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} w postaci prawa dwuparametrowego (2.58).

W pracy (Havner & Yu, 2005) jest propozycja symetryzacji, którą można przedstawić w postaci chwilowych modułów wzmocnienia (w skrócie metoda H.Y.)

$$h^{*KL} = \mathcal{K}^{KL} + (1 - \frac{1}{2}\beta) \mathbf{p}^{*K} \cdot \beta^{*L} - \frac{1}{2}\beta \mathbf{p}^{*L} \cdot \beta^{*K}, \quad 0 \leq \beta \leq 1. \quad (2.80)$$

Symbol β oznacza stałą w powyższej propozycji. Metoda H.Y. (2.80) jest kombinacją liniową metody H.S. (2.78) oraz P.A.N. (2.79). W przypadku, gdy $\beta = 0$ powyższa propozycja daje metodę H.S., gdy $\beta = 1$ metodę P.A.N.. Autorzy przedstawiają porównania

wyników eksperymentalnych i analitycznych z zastosowaniem proponowanego podejścia do jednoosiowego rozciągania kryształów o dwóch orientacjach o wysokiej symetrii $\langle 111 \rangle$ i $\langle 100 \rangle$. Porównanie jest przeprowadzone przy założeniu stałego wzmocnienia typu Taylora (2.51), $\mathcal{K}^{KL} = h$, czyli bez wzmocnienia utajonego. Ponadto autorzy zakładają brak obrotów sieci kryształu i równy (symetryczny) poślizg na 6 i 8 systemach, odpowiednio, dla orientacji $\langle 111 \rangle$ i $\langle 100 \rangle$, co wydaje się zbyt dużym uproszczeniem, por. punkt 6.1.5. Przy tych założeniach (braku obrotów sieci i symetrii poślizgów) tożsamościowo znikają dwa ostatnie człony we wzorach (2.80) powyżej. Dodatkowe założenia upraszczające w metodzie obliczeniowej można znaleźć w pracy (Havner & Shalaby, 1977). Obliczone, przy tych ograniczeniach/założeniach, wykresy naprężeń ścinających dla parametru $\beta = 1/2$, dają dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi.

Wszystkie powyżej wymienione metody mają wspólną wadę, mianowicie wprowadzają wzmocnienie utajone systemów nieaktywnych w sposób zależny od bieżącego naprężenia. Może to prowadzić do modelowania zachowania się materiału sprzecznego z wynikami doświadczalnymi nawet przy jednoosiowym rozciąganiu, co zostanie zilustrowane w podrozdziale 3.3.

2.9 Związki konstytutywne w przypadku małych deformacji - teoria geometrycznie liniowa

Zagadnienie małych sprężysto-plastycznych odkształceń kryształu jest przedstawione bez uwzględnienia obrotów sieci kryształu. Model kryształu w zakresie małych deformacji można przedstawić, podając obowiązujące równania dla naprężeń i funkcji plastyczności, przy niezmiennych, w stosunku do dużych deformacji, warunkach aktywacji (2.32) i zgodności (2.33).

Równanie konstytutywne dla naprężenia jest w postaci $\sigma = \mathbb{C} \cdot \varepsilon^e$, gdzie tensor modułów sprężystości \mathbb{C} (czyli (2.24) bez symbolu „*”, jak we wzorze (2.1)) wiąże miarę sprężystego odkształcenia $\varepsilon^e = \varepsilon - \varepsilon^p$ z miarą naprężenia σ . Równanie konstytutywne w prędkościach ma postać

$$\dot{\sigma} = \mathbb{C} \cdot (\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}^p), \quad \text{gdzie} \quad \dot{\varepsilon}^p = \sum_{L=1}^{n_S} \mu^L \overset{\circ}{\gamma}^L. \quad (2.81)$$

Prędkość zmiany plastycznego odkształcenia $\dot{\varepsilon}^p$ jest przyjęta jako suma prędkości ścinania $\overset{\circ}{\gamma}^L$ na systemach μ^L , a indeks $L = 1, \dots, n_S$ określa numery kolejnych systemów poślizgu ($\mathbf{n}^K, \mathbf{m}^K$). Stałe, w przypadku małych deformacji, kierunki plastycznego płynięcia wyznaczają symetryczne tensory drugiego rzędu $\mu^K = \mathbf{m}^K \otimes \mathbf{n}^K$. Wersory \mathbf{m}^K i \mathbf{n}^K oznaczające, odpowiednio, kierunki i płaszczyzny poślizgu nie ulegają odkształceniom i obrotom. Tensor modułów sprężystości \mathbb{C} jest niezmienny w procesie deformacji, niezależny od stanu naprężenia i odkształcenia, a jego składowe posiadają symetrie względem par indeksów oraz wewnątrz par. Równanie konstytutywne (2.81) można przekształcić do postaci

$$\dot{\sigma} = \mathbb{C} \cdot \dot{\varepsilon} - \sum_{L=1}^{n_S} \lambda^{pL} \overset{\circ}{\gamma}^L, \quad (2.82)$$

gdzie tensor $\lambda^{pK} = \mathbb{C} \cdot \mu^K$ wyznacza kierunek plastycznego płynięcia w przestrzeni odkształceń.

Funkcje plastyczności f^K występujące w kryterium aktywacji poślizgów zadane są w postaci różnic, $f^K = \tau^K - \tau_{\text{cr}}^K$, wypadkowych naprężeń ścinających Schmid'a $\tau^K = \boldsymbol{\mu}^K \cdot \boldsymbol{\sigma}$ na systemach K i odpowiednich wartości progowych τ_{cr}^K , tak jak w przypadku dużych deformacji (2.39). Podobnie jak w przypadku dużych deformacji, tutaj również początkowe wartości progowe $\tau_0 = \tau_{\text{cr}}^K$ są identyczne dla wszystkich systemów poślizgu K . Znając tensor naprężenia $\boldsymbol{\sigma}$ i zmienne τ_{cr}^K w każdej chwili deformacji można określić wartości funkcji plastyczności $f^K = f^K(\boldsymbol{\sigma}, \tau_{\text{cr}}^K)$. Prędkości zmiany funkcji plastyczności można łatwo wyznaczyć jako $\dot{f}^K = \frac{\partial f^K}{\partial \boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{L=1}^{n_S} \frac{\partial f^K}{\partial \tau_{\text{cr}}^L} \dot{\tau}_{\text{cr}}^L$. Z definicji funkcji plastyczności można wyznaczyć pochodne $\frac{\partial f^K}{\partial \tau_{\text{cr}}^L} = \delta^{KL}$, natomiast z definicji naprężenia Schmid'a wynika równość $\frac{\partial f^K}{\partial \boldsymbol{\sigma}} = \boldsymbol{\mu}^K$, por. (2.81), czyli zasada stowarzyszoneści plastycznego płynięcia. Prędkość zmiany funkcji plastyczności jest więc w postaci

$$\dot{f}^K = \boldsymbol{\mu}^K \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \dot{\tau}_{\text{cr}}^K, \quad \text{gdzie} \quad \dot{\tau}_{\text{cr}}^K = \sum_{L=1}^{n_S} \mathcal{K}^{KL} \dot{\gamma}^L. \quad (2.83)$$

Prędkości zmiany wartości krytycznych naprężeń ścinających $\dot{\tau}_{\text{cr}}^K$ są modelowane przy użyciu macierzy fizycznych modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} , por. (2.42). Wartości modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} zależą od historii plastycznej deformacji, np. poprzez zakumulowany poślizg γ (2.59).

W podsumowaniu zagadnienia teorii geometrycznie liniowej można przedstawić układ równań konstytutywnych w postaci

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\sigma}} &= \mathbb{C} \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \sum_{L=1}^{n_S} \boldsymbol{\lambda}^{PL} \dot{\gamma}^L, \\ \dot{f}^K &= \boldsymbol{\lambda}^K \cdot \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \sum_{L=1}^{n_S} g^{KL} \dot{\gamma}^L, \end{aligned} \quad (2.84)$$

gdzie $g^{KL} = \mathcal{K}^{KL} + \boldsymbol{\mu}^K \cdot \boldsymbol{\lambda}^L = \mathcal{K}^{KL} + \boldsymbol{\mu}^K \cdot \mathbb{C} \cdot \boldsymbol{\mu}^L$ jest macierzą modułów interakcji systemów poślizgu plastycznego, por. (2.44), a tensory $\boldsymbol{\lambda}^K = \boldsymbol{\lambda}^{PK}$. Moduły interakcji g^{KL} (we wzorze (2.84b)) są symetryczne jeśli moduły wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} przyjęto jako symetryczne, ponieważ człon $\boldsymbol{\mu}^K \cdot \boldsymbol{\lambda}^L$ (tu bez efektów geometrycznych, por. (2.36)) jest symetryczny. Układ równań (2.84) można przedstawić w postaci dualnej

$$\begin{aligned} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} &= \mathbb{M} \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} + \sum_{L=1}^{n_S} \boldsymbol{\mu}^{PL} \dot{\gamma}^L, \\ \dot{f}^K &= \boldsymbol{\mu}^K \cdot \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \sum_{L=1}^{n_S} \mathcal{K}^{KL} \dot{\gamma}^L, \end{aligned} \quad (2.85)$$

gdzie tensor \mathbb{M} modułów podatności o 4-tej walencji jest wyznaczany jako odwrotność tensora modułów sprężystości $\mathbb{M} = \mathbb{C}^{-1}$. Kierunek płynięcia plastycznego w przestrzeni naprężeń, zgodnie z zasadą stowarzyszoneści, określony jest przez $\boldsymbol{\mu}^{PL} = \boldsymbol{\mu}^L$ ($\Leftrightarrow \boldsymbol{\lambda}^{PL} = \boldsymbol{\lambda}^L$).

W przypadku teorii geometrycznie liniowej zachodzą równości modułów wzmocnienia: $\mathcal{K}^{KL} = h^{KL} = h^{*KL}$, por. tab. 2.3.

Rozdział 3

Zagadnienie symetryzacji macierzy modułów interakcji

W niniejszym podrozdziale zostaną przedyskutowane człony powodujące niesymetrię macierzy $[g^{KL}]$ i $[h^{KL}]$, a następnie zaproponowana nowa metoda ich symetryzacji.

Brak symetrii macierzy $[g^{KL}]$ i $[h^{KL}]$ powoduje niesymetrię przyrostowych związków konstytutywnych rozważanego modelu deformacji kryształów (podrozdział 2.4). Zastosowanie metody przyrostowej minimalizacji energii dostarczanej do materiału (por. rozdział 4), w celu rozwiązywania zagadnienia przyrostowego dla deformacji kryształów, wymaga narzucenia pewnych ograniczeń na postać związków konstytutywnych, (tab. 2.3). Ograniczenia te można sprowadzić, por. (Petryk, 2000b), do wymogu symetrii modułów interakcji (2.44),

$$g^{KL} = g^{LK}, \quad K, L \in \mathcal{A}, \quad (3.1)$$

gdzie zbiór \mathcal{A} systemów aktywnych jest wyznaczany zgodnie z (2.34).

3.1 Selektowna symetryzacja macierzy modułów interakcji

W celu analizy przyczyn niesymetrii przyrostowych związków konstytutywnych kryształu, przyjmujemy wstępnie, że chwilowe moduły wzmocnienia są w postaci $h^{*KL} = \mathcal{H}^{KL}$ spełniającej warunek symetrii $\mathcal{H}^{KL} = \mathcal{H}^{LK}$. Takie symetryczne chwilowe moduły wzmocnienia wywołują brak symetrii macierzy modułów interakcji systemów poślizgu plastycznego $[g^{KL}]$, (tab. 2.3), o składowych w postaci

$$g^{KL} = h^{*KL} + \mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*L} + \beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} \quad (3.2)$$

oraz macierzy efektywnych modułów wzmocnienia $[h^{KL}]$, (tab. 2.3), o składowych

$$h^{KL} = h^{*KL} - \beta^{*K} \cdot \mathbb{L}^{*-1} \cdot \beta^{*L} - \beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K}. \quad (3.3)$$

Łatwo zauważyć, że powyżej występujące człony $\mathbf{p}^{*K} \cdot \mathbb{L}^* \cdot \mathbf{p}^{*L}$ oraz $\beta^{*K} \cdot \mathbb{L}^{*-1} \cdot \beta^{*L}$ spełniają warunek symetrii względem indeksów K i L . Ta symetria zachodzi o ile składowe tensora \mathbb{L}^* i \mathbb{L}^{*-1} posiadają symetrię względem par indeksów, czyli $L_{ijkl}^* = L_{klij}^*$,

co jest spełnione dla hipersprężystego modelu materiału, por. podrozdział 2.4. Powyżej założono symetrię chwilowych modułów wzmocnienia $h^{*KL} = h^{*LK}$, pozostaje więc analiza członów $\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}$ występujących w modułach g^{KL} oraz członów $\beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K}$ w modułach h^{KL} . Należy zauważyć, że moduły $\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}$ tworzą macierz transponowaną względem górnych indeksów do macierzy o składowych $\beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K}$. Poszukiwane są niesymetryczne/antysymetryczne człony macierzy modułów

$$\text{skew}([g^{KL}]) = \text{skew}([h^{KL}]) = \text{skew}([\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}]), \quad (3.4)$$

gdzie $\text{skew}([\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}]) = -\text{skew}([\beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K}])$. Poszukiwana macierz antysymetrycznych członów jest wyznaczana w postaci

$$\text{skew}([\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}]) = \frac{1}{2}[\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} - \beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K}]. \quad (3.5)$$

Symbol $\text{skew}()$ oznacza antysymetryczną część tensora drugiego rzędu, por. 2.12. Przy użyciu definicji (2.37) tensora drugiego rzędu $\beta^K = \mathbf{w}^{*K}\boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}\mathbf{w}^{*K}$ oraz własności działania pełnego nasunięcia dwóch tensorów można pokazać, że

$$\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} = \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{p}^{*L} \mathbf{w}^{*K} - \mathbf{w}^{*K} \mathbf{p}^{*L}). \quad (3.6)$$

Łatwo wyznaczyć transpozycję powyższego związku względem indeksów K i L , czyli $\beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K} = \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{p}^{*K} \mathbf{w}^{*L} - \mathbf{w}^{*L} \mathbf{p}^{*K})$. Następnie, z wykorzystaniem definicji tensora symetrycznego $\mathbf{p}^{*K} = \frac{1}{2}(\mathbf{s}^{*K} + \mathbf{s}^{*K\top})$ i antysymetrycznego $\mathbf{w}^{*K} = \frac{1}{2}(\mathbf{s}^{*K} - \mathbf{s}^{*K\top})$, por. (2.12), można w związku (3.6) ujawnić diady \mathbf{s}^{*K} . Wówczas, pełne nasunięcie $\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}$ przyjmuje postać

$$\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} = \frac{1}{4} \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} - \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} + \mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L\top} \mathbf{s}^{*K} - \mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L\top} \mathbf{s}^{*K} + \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} + \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}). \quad (3.7)$$

Powyżej można poczynić uproszczenia wynikające z symetrii tensora naprężenia Kirchhoffa, czyli z równości składowych $\tau_{ij} = \tau_{ji}$. Proste nasunięcia diad \mathbf{s}^{*K} w (3.7) można przekształcić i przedstawić w postaci iloczynu tensorowego wersorów kierunków i płaszczyzn poślizgu, np.

$$\begin{aligned} \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} &= (\mathbf{m}^{*L} \otimes \mathbf{n}^{*L})(\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K}) = (\mathbf{n}^{*L} \cdot \mathbf{m}^{*K}) \mathbf{m}^{*L} \otimes \mathbf{n}^{*K}, \\ \mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L} &= (\mathbf{n}^{*K} \otimes \mathbf{m}^{*K})(\mathbf{n}^{*L} \otimes \mathbf{m}^{*L}) = (\mathbf{m}^{*K} \cdot \mathbf{n}^{*L}) \mathbf{n}^{*K} \otimes \mathbf{m}^{*L}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Teraz z kolei można wyznaczyć pełne nasunięcia tensorów drugiego rzędu

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} &= \tau_{ij} (\mathbf{n}^{*L} \cdot \mathbf{m}^{*K}) m_i^{*L} n_j^{*K}, \\ \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L} &= \tau_{ji} (\mathbf{m}^{*K} \cdot \mathbf{n}^{*L}) n_i^{*K} m_j^{*L} \end{aligned} \quad (3.9)$$

i zauważyć, że z symetrii tensora naprężenia Kirchhoffa wynika równość powyższych iloczynów skalarnych, czyli równość $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L}$. Postępując analogicznie można wyprowadzić równość $\boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} = \boldsymbol{\tau} \cdot \mathbf{s}^{*L\top} \mathbf{s}^{*K}$. Następnie, można wyznaczyć kolejne iloczyny skalarne oraz zauważyć równości $\boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L}) = \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{s}^{*L\top} \mathbf{s}^{*K})$ i $\boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L}) = \boldsymbol{\tau} \cdot (\mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K})$. Po uwzględnieniu powyżej pokazanych równości iloczynów skalarnych można znacząco uprościć pełne nasunięcia tensorów (3.7) do postaci

$$\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau} \cdot \left(\underbrace{\mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} - \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L}}_{\text{antysymetryczny}} - \underbrace{\mathbf{s}^{*K\top} \mathbf{s}^{*L} + \mathbf{s}^{*L\top} \mathbf{s}^{*K}}_{\text{symetryczny}} \right). \quad (3.10)$$

Z wykorzystaniem związku (3.10) można wyznaczyć część antysymetryczną pełnego nansunięcia (3.5) względem indeksów K i L . W przypadku, gdy moduły $h^{*KL} = h^{*LK}$ są symetryczne, to obie macierze $[g^{KL}]$ i $[h^{KL}]$ zawierają identyczny antysymetryczny człon

$$\text{skew}([\beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}]) = -\frac{1}{2}\tau \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}). \quad (3.11)$$

W ogólności, różnica modułów interakcji wynosi więc

$$g^{KL} - g^{LK} = h^{*KL} - h^{*LK} - \tau \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}). \quad (3.12)$$

Proponowana metoda selektywnej symetryzacji macierzy $[g^{KL}]$ oraz $[h^{KL}]$ polega na dodaniu do fizycznych modułów $\mathcal{H}^{KL} = \mathcal{H}^{LK}$ wzmocnienia, **wyłącznie dla systemów aktywnych**, symetryzującego członu w postaci kombinacji liniowej $\tau \cdot (r \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - (1-r) \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K})$ z parametrem $0 \leq r \leq 1$. Proponowana symetryzacja przyrostowych związków konstytutywnych niesprężystego modelu kryształu, polega na przyjęciu zmodyfikowanych chwilowych modułów wzmocnienia (2.42) w postaci

$$h^{*KL} = \begin{cases} \mathcal{H}^{KL} + \tau \cdot (r \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - (1-r) \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}), & \text{jeżeli } K, L \in \mathcal{A}, \\ \mathcal{H}^{KL}, & \text{w przeciwnym wypadku,} \end{cases} \quad (3.13)$$

gdzie parametr $0 \leq r \leq 1$. Powyższa propozycja modyfikacji chwilowych modułów wzmocnienia h^{*KL} spełnia wymóg symetrii (3.1) sformułowany w pracy (Petryk, 2000b).

Proponowaną symetryzację (3.13) można porównać ze stosowanymi dotychczas metodami. Historycznie pierwsza z nich to metoda H.S. (2.78) wg pracy (Havner & Shalaby, 1977)

$$h^{*KL} = \mathcal{H}^{KL} + \beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K} = \mathcal{H}^{KL} + \frac{1}{2}\tau \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} - \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} + \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}). \quad (3.14)$$

Z powyższego podkreślonego członu wynika, że metoda symetryzacji H.S. modyfikuje również część symetryczną macierzy $[g^{KL}]$ i $[h^{KL}]$. Modyfikacja związków konstytutywnych przy użyciu metody H.S. może powodować dodatkowe, niepożądane wzmocnienie lub osłabianie. Również w przypadku metody H.Y. (2.80) proponowanej w pracy (Havner & Yu, 2005) występuje analogiczna modyfikacja części symetrycznej składowych

$$\begin{aligned} h^{*KL} &= \mathcal{H}^{KL} + (1 - \frac{1}{2}\beta) \mathbf{p}^{*K} \cdot \beta^{*L} - \frac{1}{2}\beta \mathbf{p}^{*L} \cdot \beta^{*K} = \\ &= \mathcal{H}^{KL} + \frac{1}{2}\tau \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} + (1 - \beta)(-\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} + \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K})). \end{aligned} \quad (3.15)$$

W szczególnym przypadku, gdy w powyższym wzorze zostanie ustalona wartość parametru β , np. zgodnie z propozycją $\beta = \frac{1}{2}$ w pracy (Havner & Yu, 2005), można wyznaczyć modyfikację części symetrycznej w postaci

$$\begin{aligned} h^{*KL} &= \mathcal{H}^{KL} + \frac{1}{4}(3 \beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K} - \beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}) \\ &= \mathcal{H}^{KL} + \frac{1}{2}\tau \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K} + \frac{1}{2}(\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} + \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K})). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Metodę symetryzacji P.A.N. (2.79), por. (Peirce et al., 1982), można przekształcić do postaci

$$h^{*KL} = \mathcal{H}^{KL} + \frac{1}{2}(\beta^{*L} \cdot \mathbf{p}^{*K} - \beta^{*K} \cdot \mathbf{p}^{*L}) = \mathcal{H}^{KL} + \frac{1}{2}\tau \cdot (\mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}). \quad (3.17)$$

Z powyższego wzoru wynika, że metoda P.A.N. odpowiada proponowanej tutaj metodzie symetryzacji (3.13) w przypadku, gdy parametr $r = \frac{1}{2}$. Należy zauważyć, że metoda P.A.N. nie wprowadza błędnej modyfikacji symetrycznych członów do macierzy wzmocnienia. Natomiast zasadnicza różnica pomiędzy metodą P.A.N. a metodą selektywnej symetryzacji (3.13) polega na tym, że metoda P.A.N. (podobnie jak H.S. i H.Y.) wymaga modyfikacji wszystkich członów macierzy h^{*KL} , więc także tych odpowiadających za wzmocnienie nieaktywnych systemów poślizgu, por. analizę zawartą w podrozdziale 3.3.

Przy użyciu operacji transformacji tensorów naprężenia $\tau = \mathbf{F}^* \mathbf{T}^* \mathbf{F}^{*\top}$ oraz diad $\mathbf{s}^{*K} = \mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K} = \mathbf{F}^* (\mathbf{m}^K \otimes \mathbf{n}^K) \mathbf{F}^{*-1}$, człon symetryzujący we wzorze (3.13) można przekształcić tak, aby ujawnić wielkości zdefiniowane w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P , czyli

$$\tau \cdot (r \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - (1-r) \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K}) = \mathbf{M}^* \cdot (r \mathbf{s}^K \mathbf{s}^L - (1-r) \mathbf{s}^L \mathbf{s}^K). \quad (3.18)$$

Powyżej wprowadzono niesymetryczny tensor naprężenia Mandela $\mathbf{M}^* = \mathbf{F}^{*\top} \mathbf{F}^* \mathbf{T}^* = \mathbf{C}^* \mathbf{T}^* = \mathbf{F}^{*\top} \tau \mathbf{F}^{*-\top}$ oraz człon $(r \mathbf{s}^K \mathbf{s}^L - (1-r) \mathbf{s}^L \mathbf{s}^K)$ w postaci różnicy prostych nasunięć diad, obie wielkości są odniesione do konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P . Należy zauważyć, że proste nasunięcia diad $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L = (\mathbf{n}^K \cdot \mathbf{m}^L) \mathbf{m}^K \otimes \mathbf{n}^L$ w konfiguracji odciążonej mają stałe wartości, które zależą tylko od wzajemnej orientacji systemów poślizgu. Niesymetryczną macierz $[\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L]$ zawierającą podmacierze składowych tensorów (w postaci prostego nasunięcia diad) tylko dla 12 dodatnich systemów poślizgu (por. z macierzą (2.61)) można przedstawić w następującej postaci

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & a1b1 & a1b2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & a1c2 & a1c3 & a1d1 & \mathbf{0} & a1d3 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & a2b1 & a2b2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & a2c2 & a2c3 & a2d1 & \mathbf{0} & a2d3 \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & a3b1 & a3b2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & a3c2 & a3c3 & a3d1 & \mathbf{0} & a3d3 \\ b1a1 & b1a2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & b1c1 & \mathbf{0} & b1c3 & \mathbf{0} & b1d2 & b1d3 \\ b2a1 & b2a2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & b2c1 & \mathbf{0} & b2c3 & \mathbf{0} & b2d2 & b2d3 \\ b3a1 & b3a2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & b3c1 & \mathbf{0} & b3c3 & \mathbf{0} & b3d2 & b3d3 \\ \mathbf{0} & c1a2 & c1a3 & c1b1 & \mathbf{0} & c1b3 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & c1d1 & c1d2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & c2a2 & c2a3 & c2b1 & \mathbf{0} & c2b3 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & c2d1 & c2d2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & c3a2 & c3a3 & c3b1 & \mathbf{0} & c3b3 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & c3d1 & c3d2 & \mathbf{0} \\ d1a1 & \mathbf{0} & d1a3 & \mathbf{0} & d1b2 & d1b3 & d1c1 & d1c2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ d2a1 & \mathbf{0} & d2a3 & \mathbf{0} & d2b2 & d2b3 & d2c1 & d2c2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ d3a1 & \mathbf{0} & d3a3 & \mathbf{0} & d3b2 & d3b3 & d3c1 & d3c2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad (3.19)$$

gdzie symbol $\mathbf{0}$ oznacza macierz o wszystkich elementach równych zeru i wymiarze (3×3) , natomiast pozostałe symbole oznaczają macierze składowych prostego nasunięcia diad, np. $b1a2 \sim \mathbf{s}^{b1} \mathbf{s}^{a2} \sim (\mathbf{n}^{b1} \cdot \mathbf{m}^{a2}) m_i^{b1} n_j^{a2}$. Iloczyny $\mathbf{s}^L \mathbf{s}^K$ tworzą macierz składowych $[\mathbf{s}^L \mathbf{s}^K]$ transponowaną do powyżej przedstawionej niesymetrycznej macierzy $[\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L]$. Biorąc pod uwagę dwanaście dodatnich systemów, w rezultacie prostego nasunięcia diad $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L$ dla wybranego systemu K można wyznaczyć sześć tensorów zerowych $\mathbf{0}$, por. (3.19). Każdemu wektorowi \mathbf{n} można przyporządkować sześć ortogonalnych wektorów \mathbf{m} (z dwunastu możliwych), gdy para systemów jest tak zorientowana względem siebie, że iloczyn skalarny $\mathbf{n}^K \cdot \mathbf{m}^L = 0$. Tensor $\mathbf{0}$ powstaje na skutek działania prostego nasunięcia diad identycznych systemów ($\mathbf{s}^K \mathbf{s}^K$, więc ich wzajemne oddziaływanie jest

typu sh wg tab. 2.4), gdy systemy K i L są współpłaszczyznowe (czyli $\mathbf{n}^K = \mathbf{n}^L$, oddziaływanie systemów jest typu cp) oraz współliniowe ($\mathbf{m}^K = \mathbf{m}^L$, wzajemne oddziaływanie jest typu cl). Dla każdego z systemów K można znaleźć jeszcze dwa systemy L o kierunku poślizgu ortogonalnym do normalnej systemu K , charakter tego oddziaływania jest typu gj wg tab. 2.4.

Macierz utworzona z prostych nasunięć $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L$, por. (3.14) i (3.14), nie posiada żadnych zerowych podbloków $\mathbf{0}$, ponieważ iloczyn skalarny wektorów ($\mathbf{n}^K \cdot \mathbf{n}^L$) przyjmuje zawsze niezerowe wartości, $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L \sim (\mathbf{n}^K \cdot \mathbf{n}^L) m_i^K m_j^L$.

W macierzy jaką tworzą proste nasunięcia $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L$, por. (3.14) i (3.14), występują człony zerowe $\mathbf{0}$ zawsze, gdy występuje iloczyn ortogonalnych kierunków poślizgu ($\mathbf{m}^K \cdot \mathbf{m}^L$), $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L \sim (\mathbf{m}^K \cdot \mathbf{m}^L) n_i^K n_j^L$.

Należy zauważyć, że otrzymywany powyżej człon zerowy $\mathbf{0}$ w wyniku pełnych nasunięć wybranych diad $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L$, $\mathbf{s}^L \mathbf{s}^K$ oraz $\mathbf{s}^K \mathbf{s}^L$ w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P , por. (3.19), jest także tensorem zerowym w konfiguracji aktualnej \mathcal{C} .

W dalszej części niniejszej rozprawy zamieszczono wyniki testów rozciągania jednoosiowego, por. punkt 6.1.3. Kierunek rozciągania leży często wewnątrz trójkąta podstawowego, tak że pierwszy aktywny (pierwotny) system poślizgu to $a\bar{2}$, a wtórny to $b1$. Tensor naprężenia Kirchhoffa τ , w globalnym układzie odniesienia \bar{K}_S , ma tylko jedną niezerową składową $\bar{\tau}_{33}$. Proste nasunięcia diad systemu $a\bar{2}$ i $b1$, w konfiguracji aktualnej oraz odciążonej, tworzą tensory zerowe $\mathbf{s}^{*a\bar{2}} \mathbf{s}^{*a\bar{2}} = \mathbf{s}^{*b1} \mathbf{s}^{*b1} = \mathbf{0}$ oraz $\mathbf{s}^{a\bar{2}} \mathbf{s}^{a\bar{2}} = \mathbf{s}^{b1} \mathbf{s}^{b1} = \mathbf{0}$. Człony korygujące na diagonalu macierzy wzmocnienia (3.13) mają zawsze wartości zerowe, czyli $\tau \cdot \mathbf{s}^{*a\bar{2}} \mathbf{s}^{*a\bar{2}} = 0$ i $\tau \cdot \mathbf{s}^{*b1} \mathbf{s}^{*b1} = 0$. Zerowe wartości są również w przypadku systemów współpłaszczyznowych. Można obliczyć proste nasunięcia diad pary systemów $a\bar{2}$ i $b1$ w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P w postaci

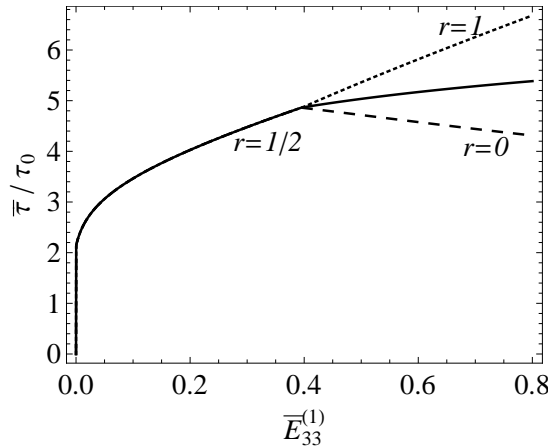
$$\mathbf{s}^{b1} \mathbf{s}^{a\bar{2}} \sim b1a\bar{2} = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{s}^{a\bar{2}} \mathbf{s}^{b1} \sim a\bar{2}b1 = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Niezerowe składowe powyższych macierzy, np. $(\mathbf{s}^{b1} \mathbf{s}^{a\bar{2}})_{21}$, są o stałych wartościach ($\mathbf{n}^{b1} \cdot \mathbf{m}^{a\bar{2}}) m_2^{b1} \otimes n_1^{a\bar{2}} = \frac{1}{3}$. Człony korygujące w modułach wzmocnienia (3.13) dla utajonego wzmocnienia systemu wtórnego przyjmują niezerowe wartości $\tau \cdot \mathbf{s}^{*b1} \mathbf{s}^{*a\bar{2}}$ i $\tau \cdot \mathbf{s}^{*a\bar{2}} \mathbf{s}^{*b1}$.

3.2 Charakterystyka selektywnej symetryzacji i wpływu parametru r

Charakterystyka działania selektywnej symetryzacji (3.13) wraz z wpływem wartości parametru r jest pokazana na przykładzie modelowania testu rozciągania jednoosiowego kryształu, por. punkt 6.1.3. Numeryczna symulacja procesu jednoosiowego rozciągania została przeprowadzona dla trzech wybranych wartości parametru $r = 0, \frac{1}{2}, 1$. Pozostałe potrzebne dane, takie, jak wartości modułów sprężystości i plastyczności zostały przyjęte jak w przypadku numerycznej symulacji prostego ścinania kryształu zamieszczonej w punkcie 6.1.1 poniżej. Początkowa orientacja kierunków sieci kryształu względem kierunku rozciągania jest wyznaczona przez trzy kąty Eulera o wartościach $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = (1, -\frac{31}{180}, \frac{146.3}{180}) \pi$, por. (5.15). Orientacja sieci kryształu jest wybrana tak,

że ślad osi rozciągania $ND = \bar{\mathbf{e}}_3$ wypada wewnątrz trójkąta podstawowego rzutu stereograficznego, por. rys. 3.3, oś ND pokrywa się z krystalograficznym kierunkiem $[\bar{2}36]$. Zachowanie kryształu podczas testu jednoosiowego rozciągania jest obszernie przebadane (Taylor & Elam, 1923, 1925; Schmid & Boas, 1950; Piercy et al., 1955; Hosford et al., 1960; Jackson & Basiński, 1967; Miura et al., 1977; Saeki & Miura, 1977; Basiński & Basiński, 1979; Franciosi et al., 1980; Havner, 1992; Basiński et al., 1997; Kim & Koo, 2001; Szczerba, 2001), a przy tym nieskomplikowane pod względem sekwencji uruchamianych systemów (gdy próbki są zorientowane wewnątrz trójkąta podstawowego). Wydaje się zatem, że jest to wygodny sposób pokazania działania selektywnej symetryzacji przy różnych wartościach parametru r .



Rysunek 3.1: Porównanie trzech krzywych naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}_{33}$ w funkcji rosnącego odkształcenia inżynierskiego $\bar{E}_{33}^{(1)}$, dla trzech wybranych wartości parametru $r = 0$ (linia przerywana), $r = \frac{1}{2}$ (linia ciągła), $r = 1$ (kropkowana).

Porównane zmiany naprężenia Kirchhoffa na kierunku rozciągania ND (względem układu globalnego), dla trzech wartości parametru r , przebiegają identycznie, gdy aktywny jest jeden pierwotny system poślizgu, oznaczony jako $a\bar{2}$, por. rys. 3.1. Od chwili aktywacji drugiego wtórnego systemu poślizgu $b\bar{1}$, przy odkształceniu $\bar{E}_{33}^{(1)} \approx 0.396$, krzywe przedstawiające zmiany naprężenia otrzymane dla różnych wartości r stopniowo rozchodzą się. Od tej chwili uwidacznia się wpływ przyjętej wartości parametru r w selektywnej symetryzacji. Do odkształcenia $\bar{E}_{33}^{(1)} \approx 0.8$, we wszystkich trzech przypadkach zostały aktywowane identyczne systemy poślizgu.

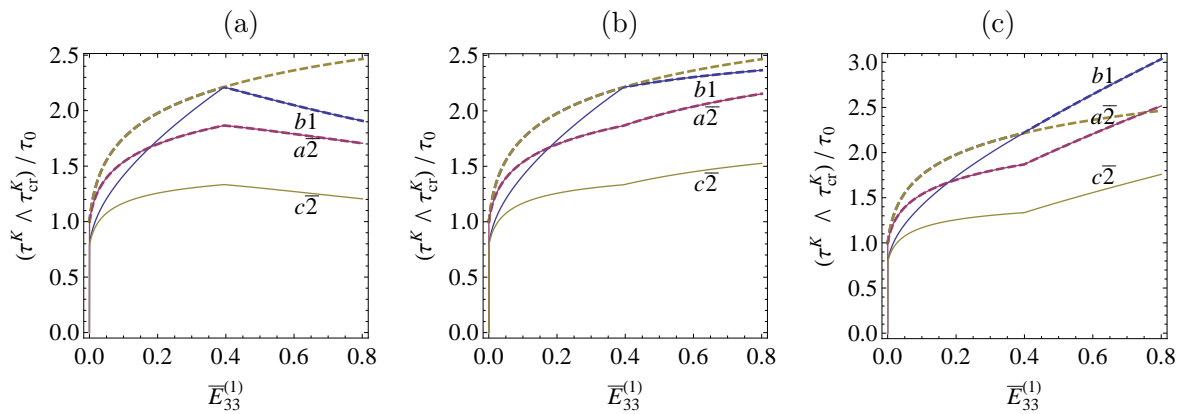
Symbol $\bar{E}_{33}^{(1)}$ oznacza składową (względem układu globalnego) tensora $\mathbf{E}^{(1)}$. Tensor $\mathbf{E}^{(1)}$ względnych odkształceń

$$\mathbf{E}^{(1)} = \sqrt{\mathbf{F}^T \mathbf{F}} - \mathbf{1} = \mathbf{U} - \mathbf{1} \quad (3.21)$$

jest nazywany tensorem odkształcenia Biota lub miarą inżynierską odkształcenia.

Widoczne na przebiegu krzywych naprężenia (rys. 3.1), miejsce skokowej zmiany pochylecia krzywych odpowiada aktywacji dodatkowego wtórnego systemu poślizgu. Przyczyny pojawienia się pęku krzywych można wyjaśnić, śledząc przebieg wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K wspólnie z przebiegiem krytycznego naprężenia ścinającego τ_{cr}^K widocznym na rys. 3.2. W celu uproszczenia formy wykresów (rys. 3.2) można pokazać przebieg wartości τ^K i τ_{cr}^K dotyczących tylko systemów uczestniczących w poślizgu plastycznym, a więc pary $(b\bar{1}, a\bar{2})$. Dodatkowo pokazany jest przebieg krzywych $\tau^{c\bar{2}}$ i $\tau_{cr}^{c\bar{2}}$

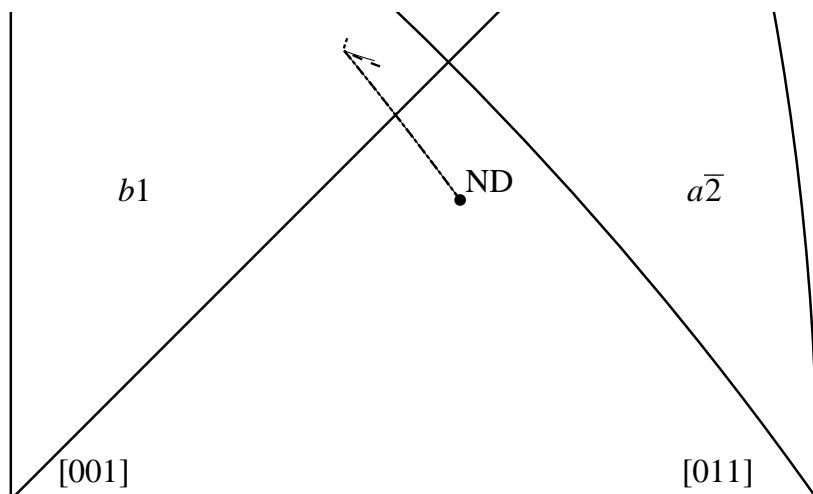
nieaktywnego systemu $c\bar{2}$. To daje wgląd w charakter tych krzywych dla pozostałych 21 niepokazanych na rysunkach 3.2 systemów. Krzywe $\tau^{a\bar{2}}$ i $\tau_{cr}^{a\bar{2}}$ dla systemu $a\bar{2}$ płynącego od początku do końca procesu deformacji są nierozróżnialne, natomiast dla systemu $b1$ wypadkowe naprężenie τ^{b1} osiąga wartość krytyczną τ_{cr}^{b1} w chwili aktywacji tego systemu, gdy $\bar{E}_{33}^{(1)} \approx 0.396$. Przyjęcie parametru $r = 0$ powoduje widoczny spadek/osłabienie pojawiające się zaraz po uruchomieniu dodatkowego systemu $b1$, na wszystkich widocznych krzywych (rys. 3.2(a)). Krzywa naprężenia wypadkowego $\tau^{c\bar{2}}$ systemu nieaktywnego $c\bar{2}$ ma charakter malejący, spowodowany obrotem sieci kryształu. Osłabienie widoczne na przebiegu wartości krytycznych naprężeń wypadkowych τ_{cr}^K jest wynikiem działania członu symetryzującego (3.13) w prawie wzmocnienia. W przypadku przyjęcia parametru $r = \frac{1}{2}$ widoczne jest ciągle wzmocnienie na systemach $\{b1, a\bar{2}, c\bar{2}\}$. Z tym, że po aktywacji dodatkowego systemu, wypadkowe naprężenie i jego wartość krytyczna dla $b1$ wzrasta wolniej, a dla $a\bar{2}$ szybciej (rys. 3.2(b)). Gdy parametr $r = 1$, widoczne jest dużo szybsze wzmocnienie dwóch systemów aktywnych $\{b1, a\bar{2}\}$, a przy tym wzrost wartości naprężenia wypadkowego $\tau_{cr}^{c\bar{2}}$ (rys. 3.2(c)).



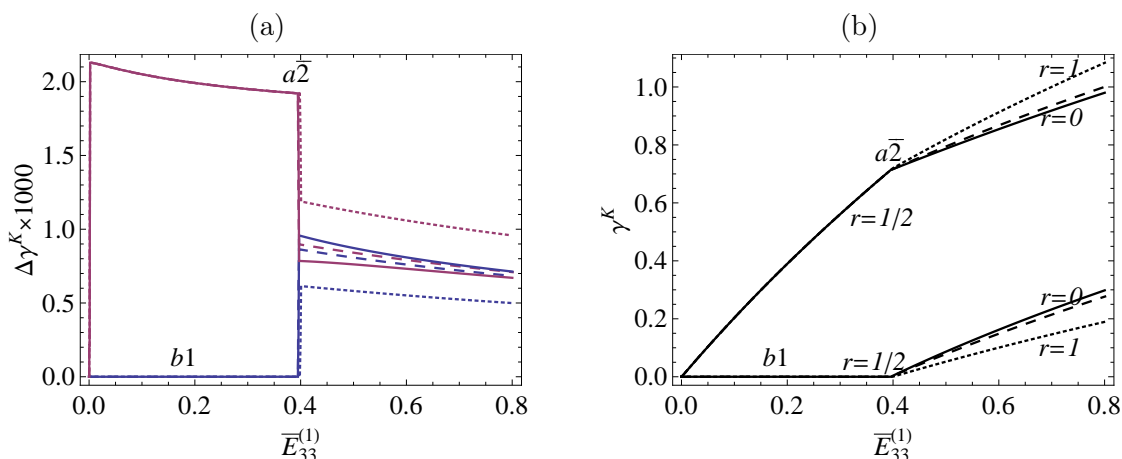
Rysunek 3.2: Wypadkowe naprężenia ścinające τ^K (jako linie ciągłe) dwóch systemów aktywnych $\mathcal{A} = \{b1, a\bar{2}\}$ i nieaktywnego systemu $c\bar{2}$ oraz wartości naprężenia krytycznego τ_{cr}^K trzech systemów (jako linie przerywane), odpowiednio, gdy $r = 0$ (a), $r = \frac{1}{2}$ (b), $r = 1$ (c).

Warto zauważyć, że przerywana krzywa $\tau_{cr}^{c\bar{2}}$ widoczna na rys. 3.2 reprezentuje przebieg wartości krytycznych, także dla pozostałych nieaktywnych systemów. Przy zastosowaniu selektywnej symetryzacji (3.13) przebieg umacniania systemów nieaktywnych wynika tylko z założonego tutaj prawa potęgowego i utajonego wzmocnienia, czyli z postaci macierzy fizycznych modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} .

Wpływ przyjętych wartości parametru r na obrót sieci kryształu jest widoczny na rys. 3.3. W pierwszym etapie deformacji, gdy aktywny jest jeden system $a\bar{2}$, trajektorie osi rozciągania ND przebiegają identycznie dla trzech badanych wartości r . Wychoząc z początkowej orientacji, kierunki rozciągania ND poruszają się po wielkim kole figury biegunowej, przecinają linię symetrii $[001]-[\bar{1}11]$ i oddalają od niej zgodnie z zadanym wzmocnieniem utajonym systemów nieaktywnych. Istotne różnice w obrotach sieci kryształu pojawiają się po aktywacji wtórnego systemu $b1$. W przypadku symulacji numerycznych przeprowadzonych z parametrami $r = 0$ i $\frac{1}{2}$, obrót sieci kryształu ma podobny charakter, który polega na zmianie obrotu sieci i stopniowym przybliżeniu trajektorii osi ND do linii symetrii $[001]-[\bar{1}11]$. Natomiast gdy $r = 1$ to sieć kryształu



Rysunek 3.3: Trzy trajektorie osi rozciągania ND względem sieci kryształu obserwowane na rzucie stereograficznym w przypadku, gdy $r = 0$ (linia przerywana), $r = \frac{1}{2}$ (linia ciągła) i $r = 1$ (kropkowana).



Rysunek 3.4: Wartości przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$ (a) i wartości ścieg γ^K (b) na dwóch systemach aktywnych $\{b1, a\bar{2}\}$ w przypadku, gdy $r = 0$ (linia przerywana), $r = \frac{1}{2}$ (linia ciągła) i $r = 1$ (kropkowana).

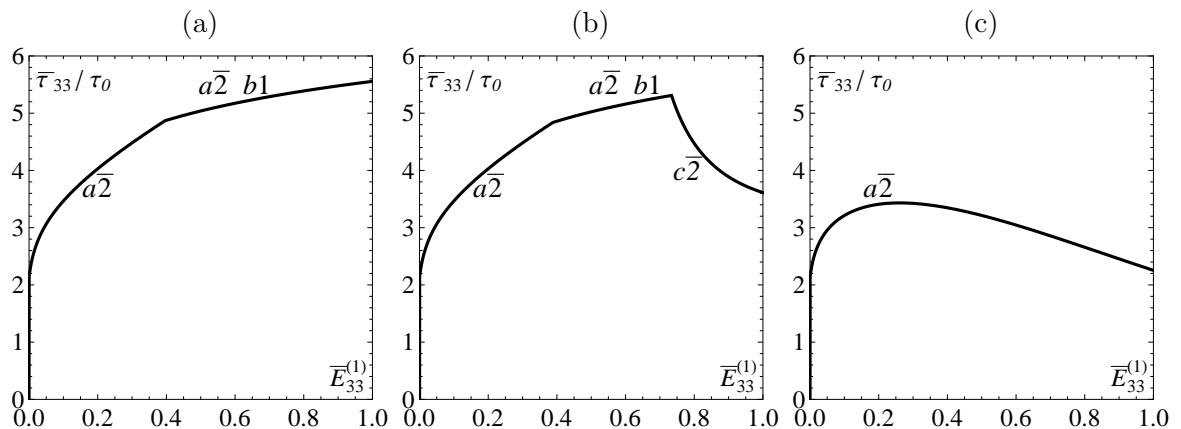
ulega obrotowi, który powoduje oddalenie osi ND od linii $[001]-[\bar{1}11]$.

Tylko w przypadku numerycznej symulacji z parametrem $r = \frac{1}{2}$ przyrost ścinania $\Delta\gamma^{b1}$ systemu wtórnego $b1$ osiąga, w chwili jego aktywacji, wartość większą od przyrostu ścinania $\Delta\gamma^{a\bar{2}}$ systemu pierwotnego (rys. 3.4). Gdy parametr r przyjmuje skrajne wartości 0 lub 1 to, obliczone przyrosty ścinania systemu dodatkowego mają mniejsze wartości od przyrostów systemu pierwotnego.

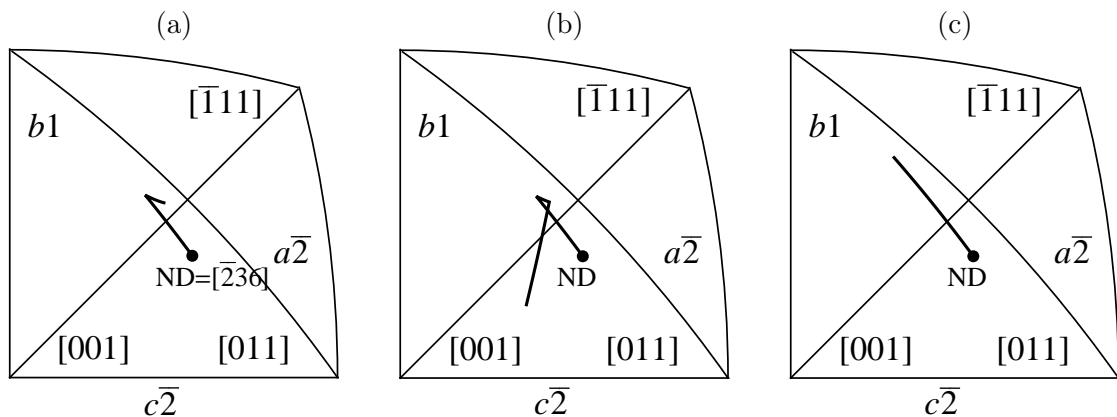
Powyższa analiza wykazuje wpływ przyjętej wartości parametru r na przebieg naprężenia podczas drugiego etapu deformacji, gdy aktywne są oba systemy poślizgu. Z porównania przebiegu powyższych krzywych z danymi doświadczalnymi (Taylor & Elam, 1925), (Schmid & Boas, 1950), (Piercy et al., 1955) można wyciągnąć wniosek, że przyjęcie, do numerycznej symulacji testu jednoosiowego rozciągania monokryształu, wartości $r = \frac{1}{2}$ dobrze odzwierciedla zarówno przebieg naprężenia i obrotu sieci kryształu.

3.3 Porównanie metod symetryzacji macierzy modułów interakcji

Analizę oraz porównanie trzech metod symetryzacji macierzy modułów interakcji g^{KL} przeprowadzono na przykładzie testu rozciągania jednoosiowego monokryształu miedzi. Te metody to selektywna symetryzacja (3.13) w przypadku, gdy parametr $r = 1/2$, metoda P.A.N. (2.79) (Peirce et al., 1982) oraz H.S. (2.78) (Havner & Shalaby, 1977). Trzy numeryczne symulacje przeprowadzono z danymi wejściowymi identycznymi jak w przypadku symulacji pokazujących wpływ parametru r , por. podrozdział 3.2. Wyniki przedstawiono na rysunkach 3.5 ÷ 3.8.



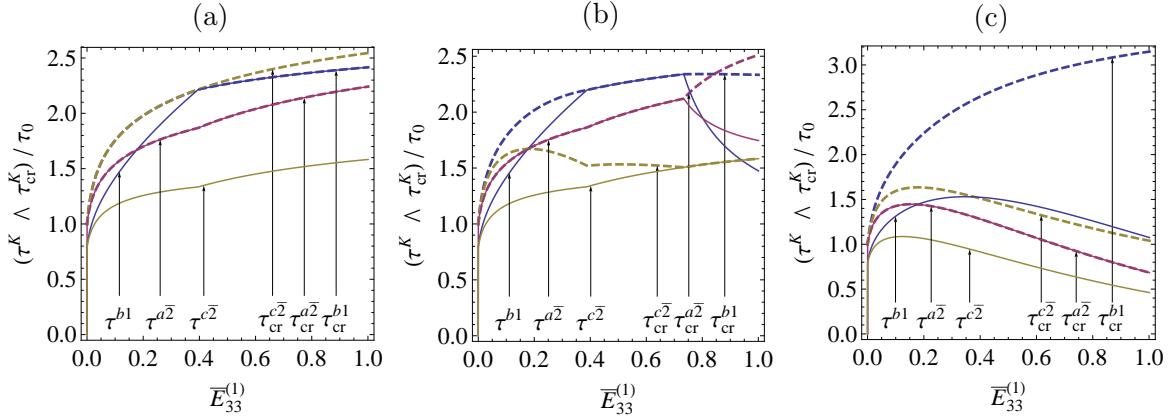
Rysunek 3.5: Krzywe naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}_{33}$ w układzie globalnym przy rosnącym odkształceniu inżynierskim $\bar{E}_{33}^{(1)}$, otrzymane przy użyciu selektywnej symetryzacji przy $r = \frac{1}{2}$ (a), metody P.A.N. (b) i metody H.S. (c).



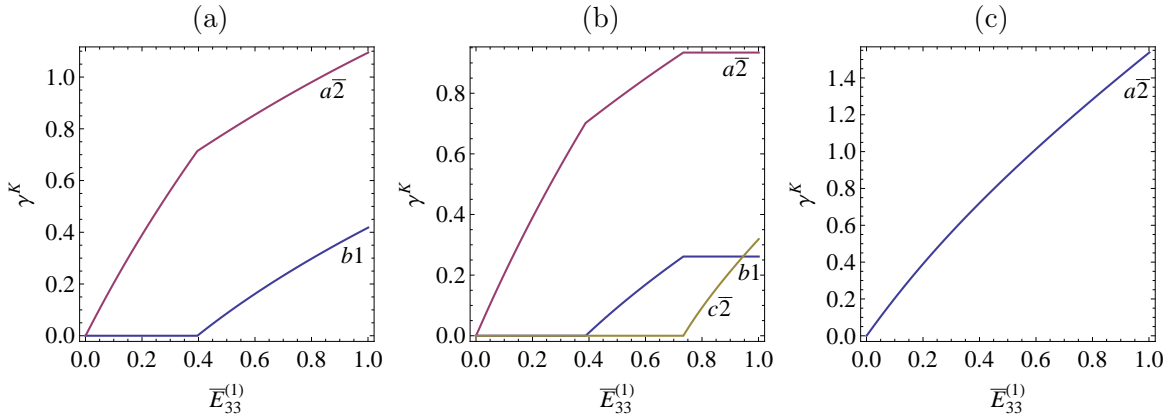
Rysunek 3.6: Trajektorie osi rozciągania $ND \rightarrow [236]$ względem sieci kryształu obserwowane na rzucie stereograficznym, otrzymane przy użyciu selektywnej symetryzacji przy $r = \frac{1}{2}$ (a), metody P.A.N. (b) i metody H.S. (c).

W przypadku numerycznej symulacji przeprowadzonej przy użyciu selektywnej symetryzacji z parametrem $r = \frac{1}{2}$, proces rozciągania można podzielić na dwa etapy, pomijając początkową sprężystą odpowiedź materiału. Pierwszy to etap, gdzie aktywny jest pojedynczy (pierwotny) system poślizgu oznaczony jako $a\bar{2}$. Wzrostowi naprężenia (rys. 3.5(a)) towarzyszy stopniowy obrót sieci kryształu widoczny na trójkącie podsta-

wowym ([001]-[011]- $\bar{1}\bar{1}1$) figury biegunowej (rys. 3.6(a)). Obrót sieci kryształu zmienia kierunek zaraz po aktywacji dodatkowego (wtórnego) systemu poślizgu $b1$. Wówczas ślad osi rozciągania ND, już po przekroczeniu linii symetrii [001]- $\bar{1}\bar{1}1$, ponownie przybliża się do linii [001]- $\bar{1}\bar{1}1$, w kierunku bieguna $\bar{1}\bar{1}2$. Drugi etap procesu deformacji, gdy aktywne są dwa systemy poślizgu $\{b1, a\bar{2}\}$, zaczyna się od widocznej zmiany nachylenia krzywej naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}_{33}$.



Rysunek 3.7: Wypadkowe naprężenia ścinające τ^K (linie ciągłe) trzech systemów $\{b1, a\bar{2}, c\bar{2}\}$ oraz naprężenie krytyczne τ_{cr}^K (linie przerywane): selektywna symetryzacja przy $r = \frac{1}{2}$ (a), metoda P.A.N. (b) i metoda H.S. (c).



Rysunek 3.8: Zmiany wartości ścinania γ^K na systemach aktywnych w przypadku selektywnej symetryzacji przy $r = \frac{1}{2}$ (a), metody P.A.N. (b) i metody H.S. (c).

Zastosowanie w numerycznej symulacji metody P.A.N. (2.79) powoduje istotną zmianę przebiegu procesu deformacji monokryształu. Pierwsze dwa z trzech etapów, które można wyróżnić na krzywej naprężenia (rys. 3.5(b)), mają podobny charakter jak w przypadku metody selektywnej symetryzacji. Po etapie płynięcia pojedynczego pierwotnego systemu poślizgu $a\bar{2}$, przy odkształceniu $\bar{E}_{33}^{(1)} \approx 0.387$, zostaje uruchomiony dodatkowy system $b1$. Trzeci etap rozpoczyna się wraz z raptownym spadkiem naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}_{33}$ względem układu globalnego. Ta nagła zmiana charakteru odpowiedzi materiału jest wynikiem odciążenia i zatrzymania, płynących dotychczas wspólnie, systemów $\{b1, a\bar{2}\}$ i uruchomienia innego systemu $c\bar{2}$, por. rys. 3.8(b). Aktywacja systemu $c\bar{2}$ jest nieprawidłowa w przypadku rozciągania przy tak zorientowanym kierunku osi ND (rys. 3.6). Wraz z aktywacją pojedynczego systemu $c\bar{2}$ sieć kryształu zmienia kierunek

obrotu na taki, nieobserwowalny doświadczalnie, że ślad osi rozciągania ND ponownie przecina linię symetrii $[001]-[\bar{1}11]$ w punkcie leżącym bliżej bieguna $[001]$ (rys. 3.6(b)). Przyczyną uruchomienia niepoprawnego systemu $c\bar{2}$ jest zastosowanie do symetryzacji macierzy modułów interakcji g^{KL} metody P.A.N.. Ta metoda powoduje silne osłabianie naprężenia krytycznego τ_{cr}^K nieaktywnego systemu $c\bar{2}$ (rys. 3.6(b)). Przy odkształceniu o wartości $\bar{E}_{33}^{(1)} \approx 0.735$ wypadkowe naprężenie $\tau^{c\bar{2}}$ osiąga wartość krytyczną $\tau_{cr}^{c\bar{2}}$ (rys. 3.7(b)) tym samym, system $c\bar{2}$ zostaje aktywowany przy równoczesnym odciążeniu dwóch płynących systemów $\{b1, a\bar{2}\}$ (rys. 3.8(b)).

Odmienny charakter przebiegu deformacji kryształu występuje przy zastosowaniu metody H.S. (2.78) w celu symetryzacji macierzy modułów interakcji g^{KL} . Po przejściu w stan plastyczny, przy odkształceniu $\bar{E}_{33}^{(1)} \approx 0.0004$ identycznie jak w innych metodach symetryzacji, przebieg naprężenia względem układu globalnego jest bez skokowych zmian nachylenia. Początkowo naprężenie $\bar{\tau}_{33}$ rośnie, ale w miarę rozwoju deformacji oraz obrotów sieci, maleje (rys. 3.5(c)). Podczas całego procesu modelowanej deformacji aktywny jest tylko jeden system poślizgu $a\bar{2}$ (rys. 3.8(c)), więc postępujący obrót sieci kryształu wynika z poślizgu na tym pojedynczym systemie i odbywa się bez zmian kierunków obrotu (rys. 3.6(c)). Po przekroczeniu przez oś rozciągania ND linii symetrii $[001]-[\bar{1}11]$ nie jest aktywowany dodatkowy system poślizgu. Poślizg na pojedynczym systemie można wyjaśnić, odwołując się do przebiegu naprężenia wypadkowych τ^K i ich wartości krytycznych τ_{cr}^K . Dominujący wpływ na wartości krytyczne naprężenia ścinającego wszystkich systemów, w początkowym stadium deformacji, ma zadany człon macierzy fizycznych modułów wzmocnienia określający wzmocnienie potęgowe. Jednak, w miarę jak rośnie deformacja, a wraz z nią naprężenia i obrót sieci kryształu, człony geometryczne występujące w chwilowej macierzy wzmocnienia zaczynają przeważać. Te geometryczne człony mają wpływ na wartości krytyczne naprężeń ścinających τ_{cr}^K wszystkich systemów więc, również tych aktywnych. Użycie metody H.S. powoduje istotne osłabienie naprężenia krytycznego systemu pierwotnego $a\bar{2}$ przy jednoczesnym nadmiernym wzmocnieniu systemu $b1$ (rys. 3.7(c)), który nie może tutaj zostać uruchomiony.

Można zauważyć, że w przypadku prostego testu rozciągania jednoosiowego, zastosowanie metody selektywnej symetryzacji z parametrem $r = \frac{1}{2}$ pozwala poprawnie modelować proces deformacji monokryształu. Znane dotychczas metody symetryzacji P.A.N (Peirce et al., 1982) i H.S. (Havner & Shalaby, 1977) powodują, w zakresie dużych deformacji, niepoprawną odpowiedź monokryształu.

Rozdział 4

Przyrostowa minimalizacja energii w modelowaniu procesów deformacji

Niniejszy rozdział zawiera opis zastosowania przyrostowej minimalizacji energii w modelowaniu procesów dużych deformacji plastycznych, w szczególności w kryształach metali. Poszukiwany stan naprężenia zależy od drogi odkształcenia, więc przebieg procesu deformacji wyznaczany jest w kolejnych dyskretnych punktach ścieżki deformacji, przy zadanych więzach kinematycznych.

Standardowe, stosowane dotychczas, podejście polega na wykorzystaniu przyrostowych związków konstytutywnych wiążących przyrosty naprężeń z przyrostami odkształceń. Przy rozwiązywaniu klasycznego, w ogólności nieliniowego, układu równań i nierówności, por. tab. 2.3, występują znane trudności związane z niejednoznacznością odpowiedzi materiału wskutek wzmocnienia utajonego systemów poślizgu przewyższającego ich samoumocnienie. Z kolei często stosowane wyeliminowanie niejednoznaczności poprzez wprowadzenie efektów lepkoplastycznych związane jest ze znaczną wrażliwością rozwiązania na początkową orientację kryształu względem osi obciążania, co prowadzi do trudności numerycznych i interpretacyjnych zwłaszcza w pobliżu orientacji o wielokrotnej symetrii. Ponadto wyeliminowanie niejednoznaczności utrudnia badanie samoistnego powstawania mikrostruktur w makroskopowo jednorodnym kryształach, co jest jednym z celów modelowania.

W niniejszej rozprawie zastosowane jest *alternatywne* podejście polegające na wyznaczaniu przebiegu procesu deformacji minimalizując na każdym kroku energię przyrostową dostarczaną do układu omówionego poniżej w podrozdziale 4.1. To wariacyjne podejście energetyczne zostało sformułowane i rozwinięte w pracach (Petryk, 1982, 1985, 1991b, 1992, 1993, 1997a, 1999, 2003, 2005) w celu wyznaczania stabilnego rozwiązania zagadnienia przyrostowego ciała niesprężystych. Wykorzystanie metody przyrostowej minimalizacji energii umożliwia wybór rozwiązania mającego sens fizyczny, poprzez odrzucenie niestabilnych ścieżek deformacji, w przypadku gdy istnieją rozwiązania niejednoznaczne. W szczególności, można wyznaczać proces deformacji materiału, gdy związki konstytutywne odpowiedniego modelu (np. sprężysto-plastycznego kryształu) dostarczają niejednoznaczne rozwiązania.

Przebieg procesu deformacji jest wyznaczany w sposób przyrostowy, dla zadawanych w każdej chwili warunków kinematycznych. Przyrostowe związki konstytutywne, określające cechy modelowanego materiału, nie są zadawane bezpośrednio, ale poprzez przyjęcie funkcjonału pracy odkształcenia. Ponieważ spełnienie przyjętych związków

konstrytutywnych modelu musi wynikać z minimalizacji energii przyrostowej, więc należy wprowadzić dodatkowe ograniczenia. Na wyjściową macierz rozwiązywanego przyrostowego układu nakładany jest wymóg symetrii, określony w pracach (Petryk, 1985, 1999, 2003). W dalszej części niniejszego rozdziału sprecyzowano ograniczenia nakładane na związki konstytutywne. W szczególności, potrzebne są kluczowe założenia o stowarzyszoneści prawa płynięcia i symetriach odpowiednich macierzy w związkach konstytutywnych.

Stosując przyrostową minimalizację energii do kryształu, w którym deformacja nie musi być równomierna, uzyskuje się możliwość opisu obserwowanego doświadczalnie spontanicznego powstawania podstruktury w formie ścianek dyslokacyjnych na granicach pasm deformacji. Tworzenie się pasm deformacji jest przewidywane teoretycznie w wyniku minimalizacji przyrostu pracy odkształcenia (Petryk, 1992, 1997a) nie spełniającego wymogu tzw. wypukłości rzędu 1. Podobne podejścia zastosowano później w pracach (Ortiz & Repetto, 1999) i (Ortiz et al., 2000) dotyczących pojedynczych kryształów, chociaż wprowadzeniu tam lepkości materiału do modelu nie towarzyszy ściśle sformułowana teoria.

4.1 Opis termodynamiczny

4.1.1 Reprezentatywny element materiału

Makroskopowy reprezentatywny element materiału \mathcal{M} zajmuje w konfiguracji odniesienia obszar \mathcal{B} o skończonej objętości V . Termodynamiczny opis w ogólności niejednorodnego reprezentatywnego elementu materiału \mathcal{M} jest przedstawiony z wykorzystaniem zmiennych makroskopowych. W każdej chwili procesu, stan reprezentatywnego elementu materiału \mathcal{M} jest charakteryzowany przez aktualną wartość trzech zmiennych oznaczonych symbolem $\mathcal{G} \equiv (\mathbf{q}, T, \boldsymbol{\alpha})$. Skalarna wielkość $T > 0$ to temperatura mierzona w skali absolutnej. Rozmiar elementu reprezentatywnego jest przyjęty jako wystarczająco mały, aby można wprowadzić założenie, że temperatura T pozostaje jednorodna wewnątrz \mathcal{M} . Do opisu deformacji zastosowano wektor przemieszczeń uogólnionych \mathbf{q} i wektor uśrednionych zmiennych wewnętrznych $\boldsymbol{\alpha}$. Wektor oznacza tutaj jednokolumnową macierz. Jeśli wartość \mathcal{G} nie zmienia się w czasie (w danej chwili) to można powiedzieć, że element \mathcal{M} jest w stanie równowagi. W przypadku, gdy element reprezentatywny \mathcal{M} znajduje się w równowadze mechanicznej to można wyznaczyć stan naprężenia. Występujące w niniejszym punkcie wielkości dotyczą tylko reprezentatywnego elementu materiału \mathcal{M} więc dla uproszczenia pominięto dolne oznaczenie \mathcal{M} . Dolne oznaczenie \mathcal{M} będzie zastosowane wszędzie tam, gdzie występujące obok siebie wielkości dotyczą różnych składowych złożonego układu termodynamicznego, por. punkt 4.1.2.

Energia swobodna Helmholtza Φ elementu reprezentatywnego \mathcal{M} jest w postaci funkcji zmiennych makroskopowych $\mathcal{G} = (\mathbf{q}, T, \boldsymbol{\alpha})$. Funkcja prędkości energii swobodnej Helmholtza $\Phi(\mathbf{q}, T, \boldsymbol{\alpha})$ jest potencjałem termodynamicznym dla trzech zmiennych stowarzyszonych z $(\mathbf{q}, T, \boldsymbol{\alpha})$,

$$\dot{\Phi} = \mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{q}} - S \dot{T} - \mathbf{A} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}}, \quad \mathbf{Q} = \frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{q}}, \quad S = -\frac{\partial \Phi}{\partial T}, \quad \mathbf{A} = -\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\alpha}}. \quad (4.1)$$

Powyższe podstawowe równanie stanu elementu reprezentatywnego \mathcal{M} jest w postaci

różniczkowej, gdzie symbol \mathbf{Q} oznacza wektor wypadkowych sił stowarzyszonych z wektorem przemieszczeń uogólnionych \mathbf{q} (siły \mathbf{Q} działają na kierunkach przemieszczeń \mathbf{q}), wielkość skalarna S to entropia makroskopowa, natomiast \mathbf{A} to zbiór sił termodynamicznych stowarzyszonych ze zmiennymi α , przedstawiony w postaci wektora. Wektor przemieszczeń uogólnionych \mathbf{q} i temperatura T są traktowane jako zmienne sterowalne. W przypadku zmiennej \mathbf{q} istnieje możliwość zadawania czy sterowania przemieszczeniami na wszystkich lub wybranych kinematycznych stopniach swobody elementu \mathcal{M} . Natomiast wektor α to zmienne niesterowalne, reprezentujące termodynamicznie nieodwracalne zmiany mikrostrukturalne jako odpowiedź materiału na wymuszenia zadane przy pomocy \mathbf{q} lub \mathbf{Q} .

Makroskopowo niesprężysta deformacja elementu \mathcal{M} może powstawać na skutek mikrostrukturalnych zmian spowodowanych ruchem dyslokacji (opisywanych na niższym poziomie). Postać tych mikrostrukturalnych zmian może być wysoce nieregularna z powodu dużej liczby lokalnych niestabilności. Z uwagi na te lokalne niestabilności, pojęcia makroskopowych prędkości odkształcenia lub naprężenia ciał niesprężystych powinny dotyczyć uśredniania po reprezentatywnej objętości materiału jak również po reprezentatywnym przyroście czasu, por. (Petryk, 2005).

Rozważając nierównowagowy proces w elemencie \mathcal{M} zachodzący między dwoma stanami w infinytymalnym przedziale czasu o długości $\delta t > 0$ można zauważyć, że proces na poziomie mikroskopowym może być rozpatrywany jako nieciągły względem czasu, natomiast będzie w skali makroskopowej rozważany jako ciągły (w sensie uśrednionym). Makroskopowe zmienne, oznaczone tu symbolicznie jako Ψ , ze względu na swój uśredniony charakter zmieniają się więc w sposób ciągły w makroskopowej skali czasu t . Prędkość dowolnej makroskopowej wielkości Ψ względem czasu t jest wyznaczana w postaci ilorazu

$$\dot{\Psi} = \frac{\delta\Psi}{\delta t}, \quad \text{gdzie} \quad \delta\Psi = \Psi(t + \delta t) - \Psi(t). \quad (4.2)$$

Wektor przemieszczeń uogólnionych \mathbf{q} zawiera wszystkie kinematyczne stopnie swobody elementu makroskopowego \mathcal{M} . Wektor \mathbf{q} można przedstawić w postaci sumy

$$\mathbf{q} = \hat{\mathbf{q}} + \tilde{\mathbf{q}}, \quad (4.3)$$

gdzie $\hat{\mathbf{q}}$ zawiera zadane przemieszczenia lub odebrane stopnie swobody elementu \mathcal{M} , natomiast $\tilde{\mathbf{q}}$ to wektor niewiadomych. Wektor wypadkowych sił można przedstawić w postaci

$$\mathbf{Q} = \tilde{\mathbf{Q}} + \hat{\mathbf{Q}}, \quad (4.4)$$

przy czym niezerowe składowe wektora $\tilde{\mathbf{Q}}$ odpowiadają składowym wektora $\hat{\mathbf{q}}$, z analogiczną odpowiedniością składowych $\hat{\mathbf{Q}}$ i $\tilde{\mathbf{q}}$, tzn.

$$\hat{\mathbf{Q}} \cdot \hat{\mathbf{q}} = \tilde{\mathbf{Q}} \cdot \tilde{\mathbf{q}} = 0. \quad (4.5)$$

4.1.2 Złożony układ termodynamiczny

Modelowane procesy deformacji zachodzą w *złożonym układzie termodynamicznym*, oznaczonym symbolem \mathcal{L} , złożonym z reprezentatywnego elementu materiału \mathcal{M} , urządzenia obciążającego \mathcal{F} i rezerwuaru ciepła \mathcal{R} . Złożony układ termodynamiczny \mathcal{L} jest

układem termodynamicznie zamkniętym oraz izolowanym przy ustalonej wartości parametru obciążania λ .

Parametr obciążania λ został wprowadzony w celu określania zmian ograniczeń zewnętrznych w trakcie modelowanego procesu. Sterowanie procesem przy użyciu parametru λ może odbywać się przez zmiany obciążeń zewnętrznych oraz zmiany wymuszeń kinematycznych. Zakładamy, że $\lambda(t)$ jest zadaną (wolno zmienną) funkcją czasu t .

Urządzenie obciążające \mathcal{F} jest zdefiniowane w postaci mechanicznego układu konserwatywnego o energii potencjalnej $\Omega_{\mathcal{F}}$, który dostarcza energię w formie pracy do elementu \mathcal{M} . Dla uproszczenia przyjmujemy, że

$$\Omega_{\mathcal{F}} = \Omega_{\mathcal{F}}(\tilde{\mathbf{q}}, \lambda) = -\hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}, \quad \text{gdzie} \quad \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}} = \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}(\lambda). \quad (4.6)$$

Symbol $\hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}$ oznacza zadany wektor wypadkowych sił obciążających. Entropia mechanicznego urządzenia obciążającego jest pomijana, więc energia potencjalna $\Omega_{\mathcal{F}}$ jest interpretowana jako energia wewnętrzna urządzenia \mathcal{F} .

Rezerwuuar ciepła \mathcal{R} utrzymuje stałą temperaturę absolutną $T_{\mathcal{R}} > 0$. Złożony układ termodynamiczny \mathcal{Z} jest izolowany termicznie, więc całkowita energia w formie ciepła Q , jaka może być dostarczana do (lub emitowana z) elementu \mathcal{M} , niezależnie od przyczyn przepływu Q , pochodzi z rezerwuuaru \mathcal{R} i jest równa $\delta Q = -\delta E_{\mathcal{R}} = -T_{\mathcal{R}}\delta S_{\mathcal{R}}$, gdzie $E_{\mathcal{R}}$ oznacza energię wewnętrzną (przy braku energii kinetycznej rezerwuuaru), a $S_{\mathcal{R}}$ entropię rezerwuuaru ciepła.

Skorzystamy z powszechnego założenia, że energie wyróżniane w układzie są addytywne, oraz że ich bilans jest zachowany. Energia całkowita $E_{\mathcal{Z}}$ (wewnętrzna i kinetyczna) oraz całkowita entropia $S_{\mathcal{Z}}$ złożonego układu termodynamicznego \mathcal{Z} mogą być przedstawione w postaci sum

$$E_{\mathcal{Z}} = U_{\mathcal{M}} + \Omega_{\mathcal{F}} + E_{\mathcal{R}} + K_{\mathcal{Z}}, \quad S_{\mathcal{Z}} = S_{\mathcal{M}} + S_{\mathcal{R}}, \quad (4.7)$$

gdzie $U_{\mathcal{M}}$ to energia wewnętrzna elementu reprezentatywnego \mathcal{M} . Makroskopowa energia kinetyczna $K_{\mathcal{Z}} \geq 0$ znika w stanie równowagi. Entropia $S_{\mathcal{M}}$ elementu reprezentatywnego \mathcal{M} jest w postaci funkcji zależnej od zmiennych $\mathcal{G} = (\mathbf{q}, T, \boldsymbol{\alpha})$. Inne możliwe postacie energii, takie jak np. energia elektryczna, są tutaj pomijane.

Element \mathcal{M} będzie wymieniał energię jedynie przez dwa typy oddziaływań. Oddziaływanie mechaniczne odbywa się poprzez urządzenie obciążające \mathcal{F} , natomiast oddziaływanie cieplne w wyniku kontaktu z rezerwuarem ciepła \mathcal{R} . Dla reprezentatywnego elementu materiału \mathcal{M} można sformułować *pierwsze prawo termodynamiki* nazywane również zasadą zachowania energii. Zasada zachowania stanowi, że prędkość zmiany energii wewnętrznej $\dot{U}_{\mathcal{M}}$ elementu reprezentatywnego jest równa prędkości pracy odkształcenia $\dot{W}_{\mathcal{M}}$ (nie obejmującej ewentualnych zmian makroskopowej energii kinetycznej) oraz prędkości zmiany energii w formie ciepła \dot{Q} pochłoniętego przez element \mathcal{M} ,

$$\dot{U}_{\mathcal{M}} = \dot{W}_{\mathcal{M}} + \dot{Q}. \quad (4.8)$$

Wykorzystując równość ciepła pochłanianego przez \mathcal{M} i energii oddawanej z rezerwuaru $\delta Q = -\delta E_{\mathcal{R}}$ oraz pierwsze prawo dla elementu \mathcal{M} , można wyznaczyć prędkość zmiany energii całkowitej $E_{\mathcal{Z}}$ (4.7) układu

$$\dot{E}_{\mathcal{Z}} = \dot{W}_{\mathcal{M}} + \dot{\Omega}_{\mathcal{F}} + \dot{K}_{\mathcal{Z}}. \quad (4.9)$$

Całkowita praca dostarczana do elementu \mathcal{M} obejmuje zmiany energii kinetycznej \mathcal{M} , wliczone do $K_{\mathcal{E}}$. W tym miejscu wprowadzamy ograniczenie do modelowania procesów quasi-statycznych, więc energia kinetyczna $K_{\mathcal{E}} \equiv 0$, czyli

$$\dot{E}_{\mathcal{E}} = \dot{W}_{\mathcal{M}} + \dot{\Omega}_{\mathcal{F}}. \quad (4.10)$$

W procesach sterowanych siłami zewnętrznymi $\hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}$ energia potencjalna obciążenia $\Omega_{\mathcal{F}}$ nie może zostać pominięta. Natomiast w modelowaniu procesów sterowanych kinematycznie, energia potencjalna $\Omega_{\mathcal{F}}$ zewnętrznych sił obciążających $\hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}$ jest zerowa, a prędkość energii całkowitej (4.10) upraszcza się do prędkości pracy odkształcenia,

$$\dot{E}_{\mathcal{E}} = \dot{W}_{\mathcal{M}}. \quad (4.11)$$

Drugie prawo termodynamiki dla złożonego układu \mathcal{Z} ma postać

$$\dot{S}_{\mathcal{E}} = \dot{S}_{\mathcal{M}} - \dot{Q}/T_{\mathcal{R}} \equiv \dot{S}^{\text{ir}} \geq 0. \quad (4.12)$$

Prędkość nieodwracalnej produkcji entropii \dot{S}^{ir} można rozłożyć na trzy człony, prędkość produkcji termicznej \dot{S}^{th} , prędkość produkcji wewnętrznej w \mathcal{M} zależną od skali czasu \dot{S}^{v} , oraz niezależną od skali czasu prędkość produkcji wewnętrznej \dot{S}^{in} . W rozprawie przyjęto ograniczenie do modelowania procesów izotermicznych, przyjmując $T \equiv T_{\mathcal{R}}$, $\dot{S}^{\text{th}} = 0$, oraz pominięto efekty zależne od skali czasu, przyjmując $\dot{S}^{\text{v}} = 0$. Prędkość dyssypacji wewnętrznej w elemencie reprezentatywnym \mathcal{M} o jednorodnej temperaturze T jest więc w postaci

$$\dot{\mathcal{D}} = T\dot{S}_{\mathcal{M}} - \dot{Q} = T\dot{S}^{\text{ir}} = T\dot{S}^{\text{in}}. \quad (4.13)$$

4.1.3 Moc odkształcenia i moc dyssypowana

Symbol $\dot{W}_{\mathcal{M}}$ oznacza prędkość pracy (czyli moc) wypadkowych sił na wirtualnych przemieszczeniach, wykonanej w reprezentatywnym elemencie materiału \mathcal{M} . Z pierwszego prawa termodynamiki (4.8) i wzoru na prędkość dyssypacji (4.13) oraz z wykorzystaniem założenia, że temperatura $T \equiv T_{\mathcal{R}}$ jest jednorodna w obszarze zajmowanym przez \mathcal{M} , można otrzymać wzór

$$\dot{W} = \dot{U} - \dot{S}T + \dot{\mathcal{D}}. \quad (4.14)$$

W niniejszym punkcie pominięto dolny indeks \mathcal{M} oznaczający wielkości opisujące reprezentatywny element materiału, czyli $W = W_{\mathcal{M}}$, $U = U_{\mathcal{M}}$, $S = S_{\mathcal{M}}$, $T = T_{\mathcal{M}}$, itd..

Suma energii wewnętrznej U (U jest potencjałem termodynamicznym jako funkcja miar deformacji, entropii i zmiennych wewnętrznych) i energii przekazywanej w formie ciepła $-ST$ jest nazywana energią swobodną Helmholtza $\Phi = U - ST$, por. (4.1). Należy zauważyć, że energia swobodna jest energią wewnętrzną przetransformowaną przy użyciu transformacji Legendre'a. Z definicji energii swobodnej wynika wzór na prędkość energii wewnętrznej $\dot{U} = \dot{\Phi} + S\dot{T} + \dot{S}T$. Po wprowadzeniu energii swobodnej, prędkość pracy odkształcenia \dot{W} przy przyjętym założeniu $T = \text{const}$ wyraża się wzorem

$$\dot{W} = \dot{\Phi} + \dot{\mathcal{D}}. \quad (4.15)$$

Do powyższego wzoru można wprowadzić wyrażenie na prędkość energii swobodnej (4.1), wówczas prędkość pracy odkształcenia ma postać

$$\dot{W} = \mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \mathbf{A} \cdot \dot{\boldsymbol{\alpha}} + \dot{\mathcal{D}}. \quad (4.16)$$

Powyższą równość można przedstawić w formie

$$\dot{W} - \mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{q}} = \dot{\mathcal{D}} - \mathbf{A} \cdot \dot{\alpha}. \quad (4.17)$$

Dla *rzeczywistych* prędkości zmian $(\dot{\mathbf{q}}^0, \dot{\alpha}^0)$, z definicji prędkości pracy odkształcenia \dot{W} przy nieujemności dyssypacji wewnętrznej $\dot{\mathcal{D}}$ wynika, że

$$\dot{W}^0 = \mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{q}}^0 \quad \text{oraz} \quad \dot{\mathcal{D}}^0 = \mathbf{A} \cdot \dot{\alpha}^0 \geq 0. \quad (4.18)$$

Sytuacja wygląda inaczej dla *wirtualnych* prędkości $(\dot{\mathbf{q}}, \dot{\alpha})$, dla których równość (4.17) nadal obowiązuje, ale niekoniecznie przy występowaniu równości (4.18). Symbol $\dot{\alpha}$ oznacza wirtualne strukturalne przeorganizowania w reprezentatywnym elemencie materialnym \mathcal{M} . Wirtualna prędkość wewnętrznej dyssypacji $\dot{\mathcal{D}}$ na poziomie makroskopowym jest założona jako niezależna od skali czasu funkcja D . W szczególności będziemy zakładać, że w zadanej temperaturze $T = T_{\infty}$ funkcja dyssypacji

$$\dot{\mathcal{D}} = D(\alpha, \dot{\alpha}) \geq 0 \quad (4.19)$$

jest funkcją o wartościach nieujemnych, jednorodną rzędu pierwszego względem $\dot{\alpha}$, tzn. $D(\alpha, r \dot{\alpha}) = r D(\alpha, \dot{\alpha})$ dla każdego $r > 0$. Funkcja D zależy od stanu poprzez α i nie zależy od deformacji \mathbf{q} .

Jeśli jakieś szczególne $\dot{\alpha}$ odpowiadają procesowi rzeczywistemu to funkcja D powinna dać rzeczywistą wartość prędkości dyssypacji. Funkcja D jest liniowa względem $\dot{\alpha}$ wewnątrz stożka $\mathcal{L}(\mathcal{G})$ w przestrzeni zmiennych $\dot{\alpha}$,

$$D(\mathcal{G}, \dot{\alpha}) = \mathbf{A}(\mathcal{G}) \cdot \dot{\alpha} \quad \text{dla każdego } \dot{\alpha} \in \mathcal{L}(\mathcal{G}). \quad (4.20)$$

Stożek $\mathcal{L}(\mathcal{G})$ (w przestrzeni zmiennych $\dot{\alpha}$) zawiera wszystkie $\dot{\alpha}$ odpowiadające rzeczywistym siłom termodynamicznym $\mathbf{A}(\mathcal{G})$, czyli $\mathcal{L}(\mathcal{G}) = \{\dot{\alpha} : D(\mathcal{G}, \dot{\alpha}) = \mathbf{A}(\mathcal{G}) \cdot \dot{\alpha}\}$.

4.1.4 Materiał z wieloma mechanizmami deformacji niesprężystej

Niniejszy podrozdział zawiera omówienie prędkości zmian energii całkowitej $\dot{E}_{\mathcal{E}}$ (4.10), gdy moc odkształcenia \dot{W} (4.16) jest wyznaczana w elemencie reprezentatywnym \mathcal{M} materiału o wielu mechanizmach niesprężystej deformacji, por. (Petryk, 2005).

W zagadnieniach termodynamiki, zmiany wewnętrznej struktury materiału są często opisywane przy pomocy wewnętrznych zmiennych stanu. W niniejszej pracy, wewnętrzne zmienne stanu spełniają pomocniczą rolę. W ogólności, ich liczba i skalarny lub tensorowy charakter nie jest ustalony. Dla celów niniejszej pracy wystarczy, że zmienne stanu są oznaczane jako α i rozważane w konfiguracji odniesienia.

Niech $f^K(\mathcal{G})$ oznacza funkcję obciążania K -tego mechanizmu deformacji

$$f^K(\mathcal{G}) \leq 0, \quad K = 1, \dots, n_M, \quad (4.21)$$

gdzie symbol n_M oznacza liczbę wszystkich mechanizmów w elemencie \mathcal{M} . Każda z funkcji f^K jest stowarzyszona tylko z jednym mechanizmem niesprężystej deformacji, może to być np. system poślizgu w kryształach. Funkcje obciążania oznaczono symbolem f^K identycznym jak funkcje plastyczności w kryształach, ponieważ obie pełnią identyczne

zadanie. Każda z funkcji obciążania jest tak dobrana, że aktualna wartość f^K daje informację o aktywności stowarzyszonego mechanizmu. Gdy funkcja obciążania f^K osiąga wartość równą zeru to K -ty mechanizm może zostać aktywowany.

Identyfikacja odpowiednich wewnętrznych zmiennych stanu α nie jest zadaniem łatwym. Tutaj nie ma potrzeby precyzyjnego zdefiniowania zmiennych α . Wystarczy wprowadzić zbiór parametrów γ^K otrzymywanych z całkowania (względem czasu) mnożników $\dot{\gamma}^K$ podobnie jak w klasycznej teorii plastyczności. Następnie, dla każdego mechanizmu K ustalamy kierunek η^K w konfiguracji odniesienia. Wówczas prędkości zmian parametrów wewnętrznych można przedstawić w postaci sumy

$$\dot{\alpha} = \sum_{K=1}^{n_M} \eta^K(\mathcal{G}) \dot{\gamma}^K, \quad (4.22)$$

gdzie η^K to wektory (tensory) o niezerowej długości. Należy zaznaczyć, że γ^K nie stanowią wewnętrznych zmiennych stanu, ponieważ aktualna wewnętrzna struktura materiału, reprezentowana przez α , może zależeć od historii $\dot{\gamma}^K$. Każdemu mechanizmowi niesprężystej deformacji jest przyporządkowany jeden (wirtualny) mnożnik $\dot{\gamma}^K \geq 0$.

Iloczyn skalarny sił termodynamicznych i prędkości parametrów wewnętrznych można przekształcić do postaci

$$\mathbf{A} \cdot \dot{\alpha} = \sum_{K=1}^{n_M} \mathbf{A} \cdot \eta^K \dot{\gamma}^K = \sum_{K=1}^{n_M} \pi^K \dot{\gamma}^K. \quad (4.23)$$

Zależne od stanu termodynamiczne siły napędowe $\pi^K = \pi^K(\mathcal{G}) = \mathbf{A} \cdot \eta^K$ to skalarne wielkości stowarzyszone z mnożnikami $\dot{\gamma}^K$, por. (Petryk, 2000b). Funkcje obciążania, dla każdego z mechanizmów niesprężystej deformacji, są zdefiniowane w postaci różnic

$$f^K = \pi^K - \pi_{\text{cr}}^K, \quad (4.24)$$

gdzie $\pi_{\text{cr}}^K = \pi_{\text{cr}}^K(\mathcal{G})$ oznaczają wartości krytyczne (progowe) termodynamicznych sił napędowych π^K . Aktualne wartości π_{cr}^K zależą od historii deformacji. Funkcja dyssypacji jest zdefiniowana w postaci sumy

$$D(\mathcal{G}, \dot{\gamma}^K) = \sum_{K=1}^{n_M} \pi_{\text{cr}}^K \dot{\gamma}^K. \quad (4.25)$$

Z wykorzystaniem powyższych wzorów (4.25), (4.23) oraz definicji funkcji obciążania (4.24) można wyznaczyć różnicę

$$D(\mathcal{G}, \dot{\gamma}^K) - \mathbf{A} \cdot \dot{\alpha} = - \sum_{K=1}^{n_M} f^K \dot{\gamma}^K. \quad (4.26)$$

Warunek termodynamicznej zgodności (4.20) sprowadza się do równości

$$f^K \dot{\gamma}^K = 0 \quad \text{dla każdego mechanizmu } K. \quad (4.27)$$

Poprzednio pokazano, że (wirtualną) prędkość pracy odkształcenia \dot{W} w reprezentatywnym elemencie materiału \mathcal{M} można przedstawić w postaci (4.16). Przy użyciu równości

(4.26) można do wzoru na prędkość pracy odkształcenia (4.16) wprowadzić siły termodynamiczne i ich wartości krytyczne ukryte w funkcji obciążania (4.24),

$$\dot{W} = \mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \sum_{K=1}^{n_M} f^K \dot{\gamma}^K. \quad (4.28)$$

Prędkość zmian energii całkowitej (4.10) termodynamicznego układu \mathcal{L} z elementem reprezentatywnym \mathcal{M} o wielu mechanizmach niesprężystej deformacji wynosi

$$\dot{E}_{\mathcal{L}} = \mathbf{Q} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \sum_{K=1}^{n_M} f^K \dot{\gamma}^K + \dot{\Omega}_{\mathcal{L}}. \quad (4.29)$$

Po podstawieniu (4.3) i (4.6) otrzymujemy

$$\dot{E}_{\mathcal{L}} = (\hat{\mathbf{Q}} - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{L}}) \cdot \dot{\mathbf{q}} - \sum_{K=1}^{n_M} f^K \dot{\gamma}^K + \tilde{\mathbf{Q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{L}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}. \quad (4.30)$$

4.2 Minimalizacja przyrostu energii układu

4.2.1 Warunki stabilności stanu równowagi układu

Klastyczny warunek termodynamicznej stabilności Gibbsa, który wynika z warunku maksymalnej entropii w stanie równowagi (z drugiego prawa termodynamiki), został rozszerzony, w celu uwzględnienia niezależnej od skali czasu prędkości dyssypacji wewnętrznej. Petryk (2005) wykazał, że ten klasyczny warunek jest zbyt restrykcyjny, ponieważ wyklucza lokalne niestabilności materiału w niższej skali i w efekcie eliminuje fizyczne przyczyny niezależnego od skali czasu niesprężystego zachowania materiału.

Wirtualny przyrost z zadanego (początkowego) stanu oznaczony symbolem Δ , odpowiada zadanemu rzeczywistemu przyrostowi $\Delta\lambda$ parametru obciążania wprowadzonemu w celu określania zmian ograniczeń zewnętrznych w procesie deformacji począwszy od chwili t aż do $t + \Delta t$. Symbol Δ oznacza wirtualny przyrost dowolnej wielkości Ψ w procesie prowadzącym od początkowego stanu równowagi \mathcal{G}^0 w chwili t , gdzie $\Psi(\mathcal{G}^0) = \Psi_t$, do dowolnego stanu końcowego \mathcal{G} w chwili $t + \Delta t$, gdzie $\Psi(\mathcal{G}) = \Psi_{t+\Delta t}$. Przyrost dowolnej wielkości Ψ jest w postaci różnicy $\Delta\Psi = \Psi(\mathcal{G}) - \Psi(\mathcal{G}^0)$. Ten wirtualny przyrost dotyczy zmiennych stanu oraz wielkości, które zależą również od ścieżki przejścia między tymi dwoma stanami. Poszukiwany przyrost energii całkowitej jest obliczany w postaci całki

$$\Delta E_{\mathcal{L}} = \int_t^{t+\Delta t} \dot{E}_{\mathcal{L}}(\tau) d\tau. \quad (4.31)$$

Energia kinetyczna jest nieujemna i znika w stanie równowagi. Warunek wystarczający termodynamicznej *stabilności stanu równowagi* układu \mathcal{L} z uwzględnieniem niezależnej od skali czasu prędkości wewnętrznej produkcji entropii \dot{S}^{in} w elemencie \mathcal{M} , (Petryk, 1995), jest w postaci

$$\Delta E_{\mathcal{L}} > 0 \quad \text{dla każdego stanu } \mathcal{G} \neq \mathcal{G}^0 \text{ przy } \Delta\lambda = 0, \quad (4.32)$$

gdzie $\Delta E_{\mathcal{L}} = \Delta W + \Delta\Omega_{\mathcal{L}}$ w procesach quasi-statycznych, por. 4.40.

Jako wymóg wstępny spełnienia (4.32), można wprowadzić *warunek rzędu pierwszego stabilności* stanu równowagi:

$$\dot{E}_{\mathcal{E}} \geq 0 \quad \text{w stanie } \mathcal{G}^0 \text{ przy } \dot{\lambda} = 0, \quad (4.33)$$

gdzie $\dot{E}_{\mathcal{E}} = \dot{W} + \dot{\Omega}_{\mathcal{F}}$ jest przybliżeniem pierwszego rzędu przyrostu $\Delta E_{\mathcal{E}}$. Pochodne występujące w warunku powyżej oznaczają przybliżenia pierwszego rzędu wirtualnych przyrostów Δ .

Dla materiału rozważanego w punkcie 4.1.4, prędkość zmian energii całkowitej (4.30) można podstawić do warunku stabilności rzędu pierwszego (4.33). Przy $\dot{\lambda} = 0$ wielkości $\dot{\hat{\mathbf{Q}}}_{\mathcal{F}}$ i $\dot{\hat{\mathbf{q}}}$ przyjmują wartości zerowe, tak więc warunek (4.33) sprowadza się do nierówności

$$\dot{E}_{\mathcal{E}} = (\hat{\mathbf{Q}} - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}) \cdot \dot{\hat{\mathbf{q}}} - \sum_{K=1}^{n_M} f^K \hat{\gamma}^K \geq 0 \quad \text{przy } \dot{\lambda} = 0. \quad (4.34)$$

Jeżeli $\hat{\gamma}^K \equiv 0$ to na mocy zasady prac wirtualnych $\dot{E}_{\mathcal{E}} \equiv 0$, gdy $\dot{\lambda} = 0$. W stanie równowagi mechanicznej ($\hat{\mathbf{Q}} = \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}$) otrzymujemy więc

$$\dot{E}_{\mathcal{E}} = - \sum_{K=1}^{n_M} f^K \hat{\gamma}^K \geq 0, \quad \text{w stanie } \mathcal{G}^0 \text{ przy } \dot{\lambda} = 0. \quad (4.35)$$

Z założenia $\hat{\gamma}^K \geq 0$ otrzymujemy końcowy warunek rzędu pierwszego stabilności stanu równowagi w postaci

$$f^K \leq 0. \quad (4.36)$$

Natomiast z warunku (4.20) i równości (4.26) otrzymujemy warunek, por. (4.27),

$$f^K \hat{\gamma}^K = 0, \quad (\text{nie sumować po } K) \quad (4.37)$$

który musi być spełniony w procesie deformacji przez aktualne wartości $\hat{\gamma}^K$. Z warunków (4.36) i (4.37), łącznie jako warunków Kuhna-Tuckera w teorii optymalizacji, otrzymujemy zasadę minimum

$$\min_{\hat{\gamma}^K \geq 0} \dot{E}_{\mathcal{E}} \stackrel{(\dot{\lambda}=0)}{=} \min_{\hat{\gamma}^K \geq 0} \left(- \sum_{K=1}^{n_M} f^K \hat{\gamma}^K \right) = 0. \quad (4.38)$$

4.2.2 Minimum energii przyrostowej układu

Zastosowane w niniejszej rozprawie podejście pozwala wyznaczać przebieg procesu deformacji, bazując na energetycznym kryterium stabilności procesów quasi-statycznych sformułowanym w pracach (Petryk, 1985, 1991a, 1999). Kryterium stabilności procesu zostało przedstawione jako warunek minimum energii przyrostowej. Energetycznie stabilne rozwiązanie klasycznego zagadnienia przyrostowego, por. tab. 2.3, będzie odpowiadać rozwiązaniu zagadnienia minimalizacji energii przyrostowej $\Delta E_{\mathcal{E}}$ w postaci

$$\boxed{\begin{array}{l} \min \Delta E_{\mathcal{E}} \\ \text{z ograniczeniami kinematycznymi przy } \Delta \lambda \neq 0. \end{array}} \quad (4.39)$$

Energia przyrostowa będzie rozumiana jako przyrost energii całkowitej $\Delta E_{\mathcal{E}}$ dostarczonej ze źródeł zewnętrznych, w procesie quasi-statycznym, do układu mechanicznego \mathcal{L} złożonego z deformowanego elementu reprezentatywnego \mathcal{M} i urządzenia obciążającego \mathcal{F} , umieszczonych w rezerwarze ciepła \mathcal{R} . Przyjęte jest założenie, że procesy deformacji zachodzą na sposób izotermiczny, więc z rozważań można usunąć zmienną T określającą temperaturę. Makroskopowy stan elementu reprezentatywnego \mathcal{M} w procesach izotermicznych jest charakteryzowany przez parę $(\mathbf{q}, \boldsymbol{\alpha})$.

Przyrost $\Delta E_{\mathcal{E}}$ może być zidentyfikowany jako wirtualna zmiana energii całkowitej układu \mathcal{L} (pod nieobecność energii kinetycznej), por. (4.10),

$$\boxed{\Delta E_{\mathcal{E}} = \Delta W + \Delta \Omega_{\mathcal{F}}.} \quad (4.40)$$

W przypadku modelowania procesów sterowanych kinematycznie, por. (4.11), przyrost energii upraszcza się do przyrostu pracy odkształcenia,

$$\Delta E_{\mathcal{E}} = \Delta W. \quad (4.41)$$

Minimalizacja energii przyrostowej rzędu pierwszego, dla materiału z wieloma mechanizmami niesprężystej deformacji, po podstawieniu wyrażenia (4.30) sprowadza się do zagadnienia

$$\min_{\dot{\mathbf{q}}, \dot{\gamma}^K \geq 0} \dot{E}_{\mathcal{E}} = \min_{\dot{\mathbf{q}}} (\dot{\mathbf{Q}} - \dot{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}}) \cdot \dot{\mathbf{q}} + \min_{\dot{\gamma}^K} \left(- \sum_{K=1}^{n_M} f^K \dot{\gamma}^K \right) + (\tilde{\mathbf{Q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}) \text{ przy } \dot{\lambda} \neq 0. \quad (4.42)$$

Ostatni człon w nawiasach ma zadaną wartość. Minimalizacja po $\dot{\mathbf{q}}$ oznacza spełnienie warunku równowagi, a minimalizacja po $\dot{\gamma}^K$ jest identyczna jak w warunku (4.38). W konsekwencji w stanie równowagi mechanicznej otrzymujemy warunek

$$\min_{\dot{\gamma}^K \geq 0} \dot{E}_{\mathcal{E}} = \min_{\dot{\gamma}^K \geq 0} \left(- \sum_{K=1}^{n_M} f^K \dot{\gamma}^K \right) + (\tilde{\mathbf{Q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}) = (\tilde{\mathbf{Q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} - \dot{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}) \quad (4.43)$$

spełniany tożsamościowo dla f^K i $\dot{\gamma}^K$ spełniających warunki (4.36) i (4.37). Dla weryfikacji warunku (4.39) należy więc rozważyć człony rzędu wyższego niż 1.

4.2.3 Przybliżenie 2-go rzędu energii przyrostowej układu

Przybliżenie wirtualnego przyrostu energii całkowitej $\Delta E_{\mathcal{E}}$ jest wyznaczone przy użyciu rozwinięcia w szereg Taylora z dokładnością do członów drugiego rzędu względem przyrostu Δt

$$\Delta E_{\mathcal{E}} = \dot{E}_{\mathcal{E}}|_t \Delta t + \frac{1}{2} \ddot{E}_{\mathcal{E}}|_t (\Delta t)^2 + \dots, \quad (4.44)$$

i nazywane *energiją przyrostową drugiego rzędu*.

Postępując analogicznie do (4.44) można wyznaczyć przyrost ΔW pracy odkształcenia, por. (4.28), wykonanej w elemencie reprezentatywnym \mathcal{M} , również w sposób przybliżony z dokładnością do członów drugiego rzędu względem przyrostu Δt . Potrzebne

w tym celu pierwsze i drugie pochodne (ang. forward rates) są wyznaczone w stanie równowagi mechanicznej \mathcal{G}^0 układu w chwili t ,

$$\dot{W} = \mathbf{Q}_t \cdot \dot{\mathbf{q}} - \sum_{K=1}^{n_M} f_t^K \dot{\gamma}^K \quad \text{oraz} \quad \ddot{W} = \dot{\mathbf{Q}} \cdot \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{Q}_t \cdot \ddot{\mathbf{q}} - \sum_{K=1}^{n_M} \dot{f}^K \dot{\gamma}^K - \sum_{K=1}^{n_M} f_t^K (\dot{\gamma}^K)'. \quad (4.45)$$

Wartości funkcji znane w stanie równowagi \mathcal{G}^0 w chwili t są oznaczone dolnym indeksem t . Przy użyciu powyższych wzorów można przedstawić przyrost pracy ΔW w postaci

$$\begin{aligned} \Delta W = & \left(\mathbf{Q} \cdot (\dot{\mathbf{q}}\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{q}}(\Delta t)^2) - \sum_{K=1}^{n_M} f^K (\dot{\gamma}^K \Delta t + \frac{1}{2}(\dot{\gamma}^K)'(\Delta t)^2) \right)_t + \\ & + \frac{1}{2} \left(\dot{\mathbf{Q}}\Delta t \cdot \dot{\mathbf{q}}\Delta t - \sum_{K=1}^{n_M} \dot{f}^K \Delta t \dot{\gamma}^K \Delta t \right)_t + \dots, \end{aligned} \quad (4.46)$$

następnie wprowadzić oznaczenia przyrostów wielkości występujących powyżej

$$\Delta \mathbf{Q} = \dot{\mathbf{Q}}\Delta t + \dots, \quad \Delta f^K = \dot{f}^K \Delta t + \dots, \quad (4.47)$$

$$\Delta \mathbf{q} = \dot{\mathbf{q}}\Delta t + \frac{1}{2}\ddot{\mathbf{q}}(\Delta t)^2 + \dots, \quad \Delta \gamma^K = \dot{\gamma}^K \Delta t + \frac{1}{2}(\dot{\gamma}^K)'(\Delta t)^2 + \dots$$

Stosując wyżej wprowadzone oznaczenia, przyrost pracy odkształcenia można przedstawić w postaci

$$\Delta W = \left(\mathbf{Q}_t \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_{K=1}^{n_M} f_t^K \Delta \gamma^K \right) + \frac{1}{2} \left(\Delta \mathbf{Q} \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_{K=1}^{n_M} \Delta f^K \Delta \gamma^K \right) + o((\Delta t)^2), \quad (4.48)$$

gdzie symbol $o(\)$ oznacza człony wyższego rzędu i jest zdefiniowany tak, że gdy $\Delta t \rightarrow 0$ to iloraz $\frac{o((\Delta t)^2)}{(\Delta t)^2} \rightarrow 0$. Należy zauważyć, że występujący powyżej człon $\sum_{K=1}^{n_M} f_t^K \Delta \gamma^K \neq 0$ nie zawsze znika dla skończonego kroku Δt , więc nie może być pominięty.

Analogicznie do rozwinięcia (4.44), przyrost pracy odkształcenia można przedstawić w postaci sumy

$$\Delta W = \Delta_1 W + \Delta_2 W + o((\Delta t)^2), \quad (4.49)$$

gdzie niezależne człony pierwszego $\Delta_1 W$ i drugiego $\Delta_2 W$ rzędu to

$$\Delta_1 W = \mathbf{Q}_t \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_{K=1}^{n_M} f_t^K \Delta \gamma^K, \quad \Delta_2 W = \frac{1}{2} \left(\Delta \mathbf{Q} \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_{K=1}^{n_M} \Delta f^K \Delta \gamma^K \right). \quad (4.50)$$

Przyrost energii potencjalnej $\Delta \Omega_{\mathcal{F}}$ urządzenia obciążającego \mathcal{F} jest również obliczony z dokładnością do członów drugiego rzędu

$$\Delta \Omega_{\mathcal{F}} = \Delta(-\hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}) = -\hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}t+\Delta t} \cdot (\tilde{\mathbf{q}}_t + \Delta \tilde{\mathbf{q}}) + \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}t} \cdot \tilde{\mathbf{q}}_t + o((\Delta t)^2). \quad (4.51)$$

Należy zauważyć, że minimalizacja przyrostu energii (4.40) względem $\Delta \mathbf{q}$, z dokładnością do członu pierwszego rzędu $\Delta_1 E_{\mathcal{F}} = \Delta_1 W + \Delta_1 \Omega_{\mathcal{F}}$ (4.53), daje rozwiązanie, które spełnia warunek równowagi mechanicznej $\hat{\mathbf{Q}}_t - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{F}t} = \mathbf{0}$ w początkowym punkcie t rozpatrywanego przyrostu.

W celu wyznaczenia poszukiwanych przyrostów $\Delta \gamma^K$ i $\Delta \mathbf{Q}$ minimalizowany przyrost energii całkowitej układu

$$\min_{\Delta \tilde{\mathbf{q}}, \Delta \gamma^K \geq 0} \Delta E_{\mathcal{F}}, \quad (4.52)$$

musi zawierać obydwie człony, czyli $\Delta E_{\mathcal{E}} = \Delta_1 E_{\mathcal{E}} + \Delta_2 E_{\mathcal{E}}$, gdzie

$$\Delta_1 E_{\mathcal{E}} = \mathbf{Q}_t \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_{K=1}^{n_M} f_t^K \Delta \gamma^K - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}t} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{q}} - \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}} \cdot \tilde{\mathbf{q}}_t, \quad (4.53)$$

$$\Delta_2 E_{\mathcal{E}} = \frac{1}{2} \left(\Delta \mathbf{Q} \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_{K=1}^{n_M} \Delta f^K \Delta \gamma^K \right) - \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}} \cdot \Delta \tilde{\mathbf{q}}. \quad (4.54)$$

4.2.4 Stacjonarność energii przyrostowej i ograniczenia konstytutywne

W punkcie minimum dla zagadnienia (4.39), warunki stacjonarności energii przyrostowej $\Delta E_{\mathcal{E}}$ określonej wzorem (4.40) względem $\Delta \tilde{\mathbf{q}}$ i $\Delta \gamma^K \neq 0$ wyrażają się poprzez zerowanie pochodnych cząstkowych:

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} = (\hat{\mathbf{Q}}_t - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}t}) + \left(\frac{1}{2} \Delta \hat{\mathbf{Q}} + \frac{1}{2} \Delta \mathbf{q} \cdot \frac{\partial \Delta \mathbf{Q}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} - \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}} \right) - \frac{1}{2} \sum_L \frac{\partial \Delta f^L}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} \Delta \gamma^L + o(\Delta t), \quad (4.55)$$

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \gamma^K} = -f_t^K - \frac{1}{2} \left(-\frac{\partial \Delta \mathbf{Q}}{\partial \Delta \gamma^K} \cdot \Delta \mathbf{q} + \Delta f^K + \sum_L \frac{\partial \Delta f^L}{\partial \Delta \gamma^K} \Delta \gamma^L \right) + o(\Delta t). \quad (4.56)$$

W tym miejscu można wprowadzić oznaczenia na pochodne przyrostów wektorów wypadkowych sił i funkcji obciążania

$$\frac{\partial \Delta \mathbf{Q}}{\partial \Delta \mathbf{q}} = \mathbf{K}, \quad \frac{\partial \Delta f^K}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} = \mathbf{N}^K, \quad \frac{\partial \Delta \mathbf{Q}}{\partial \Delta \gamma^K} = -\mathbf{N}^{PK}, \quad \frac{\partial \Delta f^K}{\partial \Delta \gamma^L} = -g^{KL}. \quad (4.57)$$

W szczególnym przypadku plastyczności kryształu, symbol g^{KL} utożsamiany będzie ze składowymi macierzy modułów interakcji systemów poślizgu (2.44). Z wykorzystaniem oznaczeń (4.57) otrzymujemy

$$\Delta \mathbf{Q} = \mathbf{K} \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_L \mathbf{N}^{PL} \Delta \gamma^L + o(\Delta t), \quad \Delta f^K = \mathbf{N}^K \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_L g^{KL} \Delta \gamma^L + o(\Delta t). \quad (4.58)$$

Po podstawieniu powyższych wyrażeń do wzorów (4.55) i (4.56), otrzymujemy zależność

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} = (\hat{\mathbf{Q}}_t - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}t} - \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}}) + \frac{1}{2} \left(\Delta \hat{\mathbf{Q}} + \Delta \mathbf{q} \cdot \mathbf{K} \cdot \frac{\partial \Delta \mathbf{q}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} - \sum_L \mathbf{N}^L \Delta \gamma^L \right) + o(\Delta t), \quad (4.59)$$

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \gamma^K} = -f_t^K - \frac{1}{2} \left(\Delta f^K + \mathbf{N}^{PK} \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_L g^{LK} \Delta \gamma^L \right) + o(\Delta t), \quad (4.60)$$

które można przekształcić, korzystając z symetrii $\mathbf{K} = \mathbf{K}^T$ i warunku (4.5) do postaci

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} = (\hat{\mathbf{Q}}_t - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}t}) + (\Delta \hat{\mathbf{Q}} - \Delta \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}}) + \frac{1}{2} \sum_L (\mathbf{N}^{PL} - \mathbf{N}^L) \Delta \gamma^L + o(\Delta t), \quad (4.61)$$

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \gamma^K} = -f_t^K - \Delta f^K + \frac{1}{2} (\mathbf{N}^K - \mathbf{N}^{PK}) \cdot \Delta \mathbf{q} - \sum_L (g^{KL} - g^{LK}) \Delta \gamma^L + o(\Delta t). \quad (4.62)$$

Nakładamy teraz warunek, aby minimalizacja energii przyrostowej $\Delta E_{\mathcal{E}}$ określonej wzorem (4.40) prowadziła tożsamościowo do spełnienia warunków równowagi, warunków termodynamicznej zgodności (4.27) i ograniczenia (4.21) na *końcu* kroku przyrostowego po pominięciu członów rzędu $o(\Delta t)$, a więc

$$\hat{\mathbf{Q}}_{t+\Delta t} - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}t+\Delta t} = \mathbf{0}, \quad f_{t+\Delta t}^K \Delta \gamma^K = 0 \quad f_{t+\Delta t}^K \leq 0. \quad (4.63)$$

Wynikają stąd ograniczenia nakładane na związki konstytutywne. Z porównania (4.61) i (4.63)₁, wynika warunek analogiczny do stowarzyszoności (normalności) kierunku deformacji niesprężystej

$$\mathbf{N}^{PK} = \mathbf{N}^K \quad \text{jeżeli } \Delta \gamma^K \neq 0, \quad (4.64)$$

tak aby po pominięciu członów rzędu $o(\Delta t)$

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \tilde{\mathbf{q}}} = \hat{\mathbf{Q}}_{t+\Delta t} - \hat{\mathbf{Q}}_{\mathcal{E}t+\Delta t} = \mathbf{0}. \quad (4.65)$$

Z warunku (4.64) wynika, że minimalizacja energii przyrostowej nie ma zastosowania w modelach o niestowarzyszonym prawie płynięcia, por. (Mróz, 1963). W przypadku kryształów niestowarzyszoność sprowadza się do nieprzestrzegania prawa Schmid'a, por. (Asaro & Rice, 1977).

Z kolei z porównania (4.62) i (4.63)₃ przy założeniu (4.64) i dla niezerowych $\Delta \gamma^K$ i $\Delta \gamma^L$ otrzymujemy warunek symetrii

$$g^{KL} = g^{LK} \quad \text{jeżeli } \Delta \gamma^K \neq 0, \Delta \gamma^L \neq 0, \quad (4.66)$$

tak aby (po pominięciu członów rzędu $o(\Delta t)$)

$$\frac{\partial \Delta E_{\mathcal{E}}}{\partial \Delta \gamma^K} = f_{t+\Delta t}^K = 0 \quad \text{jeżeli } \Delta \gamma^K \neq 0. \quad (4.67)$$

Przy założeniach (4.64) i (4.66) warunki (4.63) są spełnione (pomijając człony rzędu $o(\Delta t)$) jako warunki Kuhna-Tuckera dla minimum $\Delta E_{\mathcal{E}}$.

Podsumowując, ograniczenia konstytutywne (4.64) i (4.66) są konieczne i wystarczające, aby minimalizacja energii przyrostowej $\Delta E_{\mathcal{E}}$ (4.40) *implikowała* spełnienie warunków konstytutywnych (4.63) na końcu kroku przyrostowego przy pominięciu członów rzędu $o(\Delta t)$. Z tego względu minimalizacja proponowana w pracy (Franciosi & Zaoui, 1991) bez nałożenia warunku symetrii (4.66) odnosiła się wyłącznie do zbioru rozwiązań zagadnienia przyrostowego dla kryształu, a nie do zbioru wirtualnych przyrostów poślizgu jak powyżej. Minimalizacja zastosowana w pracach (Ortiz & Repetto, 1999; Ortiz et al., 2000) nie miała powyższego uzasadnienia teoretycznego. Uzasadnienie powyższe stanowi rozszerzenie twierdzenia z pracy (Petryk, 1999) dla infinitezymalnych przyrostów na przyrosty o małych lecz skończonych długościach.

4.3 Zastosowanie do procesu deformacji kryształu

Prędkość pracy odkształcenia \dot{W} doprowadzanej do reprezentatywnego elementu materiału \mathcal{M} jest otrzymywana w postaci całki objętościowej po obszarze \mathcal{B} zajmowanym w konfiguracji odniesienia przez element \mathcal{M} ,

$$\dot{W} = \int_{\mathcal{B}} \dot{w} dV, \quad (4.68)$$

gdzie gęstość \dot{w} jest nazywana prędkością pracy (mocą) odkształcenia na jednostkę objętości w konfiguracji odniesienia. Wszystkie występujące poniżej gęstości funkcji są odniesione do jednostki objętości w konfiguracji odniesienia. W poniższych wzorach gęstość materiału nie będzie jawnie występowała.

4.3.1 Zagadnienie deformacji kryształu

W zagadnieniu plastyczności kryształu K -ty mechanizm niesprężystej deformacji to system poślizgu, liczba mechanizmów $n_M = n_S$ to liczba dodatnich i ujemnych systemów. Mnożnik $\overset{\circ}{\gamma}^K = \overset{\circ}{\gamma}^K$ jest utożsamiany z prędkością plastycznego ścinania. Poniżej przyjęto identyfikację wektorów sił i przemieszczeń $(\mathbf{Q}, \mathbf{q}) \leftrightarrow (\mathbf{S}, \mathbf{F})$, odpowiednio, jako tensory naprężenia i gradientu deformacji, por. (2.45) i (2.46). Wartości funkcji obciążania f^K można zidentyfikować jako funkcje plastyczności, por. (2.39)

$$f^K = \pi^K - \pi_{\text{cr}}^K = \tau^K - \tau_{\text{cr}}^K, \quad (4.69)$$

czyli w postaci różnic wypadkowego naprężenia ścinającego Schmidta τ^K i jego wartości krytycznej τ_{cr}^K dla każdego systemu poślizgu plastycznego K niezależnie.

Infinitezymalny przyrost deformacji kryształu w izotermicznym procesie odpowiada parze $(\dot{\mathbf{F}}, \overset{\circ}{\gamma}^K)$ określającej odpowiednio, zmianę geometrii pomyślanej (hipotetycznej) kostki materiału oraz poślizgi na systemach. Niesymetryczna miara, jaką jest gradient deformacji $\dot{\mathbf{F}}$ jest sprzężona poprzez pracę $\dot{w} = \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{F}}$ z niesymetrycznym pierwszym tensorem naprężenia Pioli-Kirchhoffa \mathbf{S} . Równania konstytutywne dla prędkości zmian naprężenia i funkcji plastyczności z wykorzystaniem miar niesymetrycznych przedstawiono w postaci (2.45) i (2.46). Warunki aktywacji mechanizmów plastycznego płynięcia określane są w postaci układu równań i nierówności (2.32) i (2.33).

Wirtualna moc odkształcenia na jednostkę objętości w konfiguracji odniesienia ma postać

$$\dot{w} = \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{F}} - \sum_{K=1}^{n_S} f^K \overset{\circ}{\gamma}^K, \quad (4.70)$$

przy czym ostatni człon znika w procesie rzeczywistych deformacji. Gęstość przyrostu drugiego rzędu pracy odkształcenia określana jest wzorem analogicznym do (4.48),

$$\Delta w = \left(\mathbf{S}_t \cdot \Delta \mathbf{F} - \sum_{K=1}^{n_S} f_t^K \Delta \gamma^K \right) + \frac{1}{2} \left(\Delta \mathbf{S} \cdot \Delta \mathbf{F} - \sum_{K=1}^{n_S} \Delta f^K \Delta \gamma^K \right) + o((\Delta t)^2). \quad (4.71)$$

4.3.2 Minimalizacja energii 1-go rzędu

Rozważamy proces sterowany kinematycznie, w którym przyrost $\Delta \Omega_{\mathcal{F}} = 0$, skąd wynika, że $\Delta E_{\mathcal{F}} = \Delta W$ (4.41). W stanie równowagi mechanicznej, jako specyfikację warunku minimum (4.43) dla jednorodnej deformacji elementu reprezentatywnego \mathcal{M} , otrzymujemy

$$\min_{\overset{\circ}{\gamma}^K \geq 0} \dot{E}_{\mathcal{F}} = \min_{\overset{\circ}{\gamma}^K \geq 0} \left(- \int f^K \overset{\circ}{\gamma}^K dV \right) + \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{S} \cdot \dot{\mathbf{F}}. \quad (4.72)$$

Powyższy warunek minimum sprowadza się do spełnienia warunków Kuhna-Tuckera

$$\overset{\circ}{\gamma}^K \geq 0, \quad f^K \leq 0, \quad f^K \overset{\circ}{\gamma}^K = 0, \quad (4.73)$$

identycznych do przyjętych poprzednio jako postulaty (2.32). Widoczne jest, że ten postulat (łącznie z warunkami równowagi) można traktować jako konsekwencję zasady minimum energii 1-go rzędu.

4.3.3 Minimalizacja energii 2-go rzędu

Rozwiązywanie zagadnienia niesprężystej deformacji kryształu polega na wyznaczeniu poszukiwanych skończonych przyrostów ścinania plastycznego $\Delta\gamma^K$ oraz dodatkowo nieznanymi składowymi przyrostami gradientu deformacji $\Delta\mathbf{F}$ przy nałożeniu częściowych więzów kinematycznych. Poszukiwane przyrosty obliczane są dla zadanej wartości przyrostu wybranego parametru sterowania procesem deformacji $\Delta\lambda$. W chwili t znany jest stan deformacji w materiale (\mathbf{F}_t), a poszukiwane wartości przyrostów ($\Delta\mathbf{F}$, $\Delta\gamma^K$) wyznaczają stan deformacji materiału w chwili $t + \Delta t$.

Przy sterowaniu kinematycznym ($\Delta\Omega_{\mathcal{F}} = 0$), poszukiwane przyrosty są wyznaczone przy użyciu minimalizacji gęstości energii przyrostowej (4.41) obliczanej z dokładnością do członów rzędu drugiego, por. (4.71):

$$\boxed{\text{dla } \Delta\lambda \neq 0 \quad \min_{(\Delta\gamma^K, \Delta\mathbf{F})} \Delta w \quad \text{przy ograniczeniach na } (\Delta\gamma^K, \Delta\mathbf{F}).} \quad (4.74)$$

Przyrost gradientu deformacji przy przejściu od stanu t do stanu $t + \Delta t$, $\Delta\mathbf{F} = \mathbf{F}_{t+\Delta t} - \mathbf{F}_t$, można przedstawić w postaci sumy

$$\Delta\mathbf{F} = \Delta\hat{\mathbf{F}} + \Delta\tilde{\mathbf{F}}, \quad (4.75)$$

znanego przyrostu $\Delta\hat{\mathbf{F}} = \Delta\hat{\mathbf{F}}(\Delta\lambda)$ i poszukiwanego przyrostu $\Delta\tilde{\mathbf{F}}$. Wartości znanego tensora $\Delta\hat{\mathbf{F}}$ służą do sterowania przyrostem deformacji materiału na kroku $(t, t + \Delta t)$, a więc wprost zależą od zadawanej wartości $\Delta\lambda$. Natomiast wartości tensora $\Delta\tilde{\mathbf{F}}$ są nieznanymi i wyznaczone na etapie minimalizacji energii przyrostowej. Zadanie (4.74) upraszcza się, gdy przyrost gradientu deformacji jest całkowicie zadawany, $\Delta\mathbf{F} = \Delta\tilde{\mathbf{F}}$, wówczas poszukiwane są jedynie przyrosty ścinania $\Delta\gamma^K$.

Proces deformacji można śledzić z dowolną dokładnością, dzieląc ścieżkę na dowolną liczbę etapów, dla których wyznaczone są poszukiwane przyrosty ($\Delta\tilde{\mathbf{F}}$, $\Delta\gamma^K$). Dla każdego z etapów wygodnie będzie oznaczyć symbolem n wartości w równowagowym stanie początkowym, natomiast symbolem $(n + 1)$ poszukiwane wartości na końcu etapu. W dalszej części taki etap będzie nazywany krokiem obciążania lub deformacji. W każdym kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) gęstość przyrostu energii Δw dostarczanej do układu można przedstawić w postaci, por. (4.48) i (4.71),

$$\Delta w = \frac{1}{2}(\mathbf{S}_n + \mathbf{S}_{n+1}) \cdot \Delta\mathbf{F} - \frac{1}{2} \sum_{K=1}^{n_S} (f_n^K + f_{n+1}^K) \Delta\gamma^K + o((\Delta t)^2). \quad (4.76)$$

Nieznane, końcowe dla danego kroku (t_n, t_{n+1}) , wartości naprężenia $\mathbf{S}_{n+1}(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})$ i funkcji plastyczności $f_{n+1}^K(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})$ można wyznaczyć z wykorzystaniem równań (2.45), (2.46) przedstawionych w formie przyrostowej, por. (4.47),

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}\Delta t \rightarrow \Delta\mathbf{S} &= \mathbf{S}_{n+1} - \mathbf{S}_n = \mathbb{A} \cdot \Delta\mathbf{F} - \sum_{L=1}^{n_S} \mathbf{\Lambda}^L \Delta\gamma^L + o(\Delta t), \\ \dot{f}^K \Delta t \rightarrow \Delta f^K &= f_{n+1}^K - f_n^K = \mathbf{\Lambda}^K \cdot \Delta\mathbf{F} - \sum_{L=1}^{n_S} g^{KL} \Delta\gamma^L + o(\Delta t), \end{aligned} \quad (4.77)$$

tutaj jeszcze bez ustalenia punktu przedziału (t_n, t_{n+1}) , z którego będą przyjmowane wartości \mathbb{A} , $\mathbf{\Lambda}^K$, g^{KL} . Natomiast wprowadzono tu założenia stowarzyszoności $\mathbf{\Lambda}^{PK} = \mathbf{\Lambda}^K$ (4.64) oraz symetrii $g^{KL} = g^{LK}$ dla $K, L \in \mathcal{A}$ (4.66).

Przy użyciu powyższych równań (4.77) można wyznaczyć przyrost energii (4.76) w rozwiniętej formie z jawnym przedstawieniem przyrostów $(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})$

$$\begin{aligned} \Delta w = & \frac{1}{2} \sum_{K,L=1}^{n_S} g^{KL} \Delta\gamma^K \Delta\gamma^L - \Delta\mathbf{F} \cdot \sum_{L=1}^{n_S} \mathbf{\Lambda}^L \Delta\gamma^L - \sum_{L=1}^{n_S} f_n^L \Delta\gamma^L + \\ & + \mathbf{S}_n \cdot \Delta\mathbf{F} + \frac{1}{2} \Delta\mathbf{F} \cdot \mathbb{A} \cdot \Delta\mathbf{F} + o((\Delta t)^2). \end{aligned} \quad (4.78)$$

Wielkości występujące powyżej i oznaczone symbolem n , takie jak f_n^K , \mathbf{S}_n , mają znane wartości. Należy zauważyć, że wartości funkcji plastyczności w stanie początkowym f_n^K nie muszą być równe zero, gdyż wartość $f^K = 0$ może być osiągnięta wewnątrz przedziału (t_n, t_{n+1}) .

Znając początkowy stan w chwili t_n i obliczając przyrosty $(\Delta\tilde{\mathbf{F}}, \Delta\gamma^K)$ można wyznaczyć stan poszukiwany w chwili t_{n+1} . Podstawowe zagadnienie polega na iteracyjnym rozwiązywaniu zadania minimalizacji gęstości energii przyrostowej Δw dla ustalonej długości danego kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) :

$$\text{dla danego } \Delta\hat{\mathbf{F}} \text{ oblicz} \quad \min_{(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})} \Delta w \quad \text{przy ograniczeniach:} \quad \begin{aligned} & \Delta\gamma^K \geq 0 \\ & \Delta\mathbf{F} = \Delta\hat{\mathbf{F}} + \Delta\tilde{\mathbf{F}} \end{aligned}, \quad (4.79)$$

gdzie $\Delta w = \Delta w(\Delta\gamma^K, \Delta\mathbf{F})$ oznacza przyrost gęstości energii (4.78), odpowiadający deformacji powstałej w wyniku sterowania z uwzględnieniem kinematycznych stopni swobody, przy zadanym $\Delta\hat{\mathbf{F}}$.

W przypadku kryształów typu r.s.c. poślizgi plastyczne $\Delta\gamma^K$ mogą wystąpić na 24 systemach. W dalszej części pokazano, że liczba systemów, które są uwzględniane w procedurze minimalizacji, może być istotnie ograniczona.

Jeśli proces jest w pełni kontrolowany kinematycznie tak, że w każdej chwili obciążania przyrost gradientu deformacji $\Delta\mathbf{F} = \Delta\hat{\mathbf{F}}$ jest znany, to poszukiwane są tylko wartości przyrostów ścinania plastycznego $\Delta\gamma^K \geq 0$. Wówczas, w wyrażeniu (4.78) należy pominąć dwa ostatnie człony niezawierające poszukiwanych przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$, a przyrost energii (4.78) zostanie uproszczony do niewykropkowanych członów

$$\Delta w = \frac{1}{2} \sum_{K,L=1}^{n_S} g^{KL} \Delta\gamma^K \Delta\gamma^L - \Delta\mathbf{F} \cdot \sum_{L=1}^{n_S} \mathbf{\Lambda}^L \Delta\gamma^L - \sum_{L=1}^{n_S} f_n^L \Delta\gamma^L + \dots \quad (4.80)$$

Zadanie minimum (4.79) energii przyrostowej Δw upraszcza się w przypadku pełnych więzów kinematycznych do postaci

$$\text{dla danego } \Delta\mathbf{F} \text{ oblicz} \quad \min_{(\Delta\gamma^K \geq 0)} \Delta w. \quad (4.81)$$

Rozwiązaniem jest zbiór przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$, który minimalizuje przyrost energii $\Delta w = \Delta w(\Delta\gamma^K)$, dany wzorem (4.80).

4.3.4 Kinematyczne sterowanie procesem deformacji - pełne i częściowe ograniczenia

Ścieżka deformacji materiału może być modelowana przez zadanie przebiegu niektórych składowych gradientu deformacji $\mathbf{F}(\lambda)$ i określana jako *kinematyczne sterowanie procesem*, jeżeli zadawane uzupełniające składowe tensora naprężenia \mathbf{S} są równe zeru. Parametr obciążania $\lambda = \lambda(t)$ jest wprowadzony w celu sterowania procesem deformacji również w przypadku modelowania cyklicznych obciążeń, gdy λ może rosnać, a następnie maleć. W szczególności, gdy materiał jest monotonicznie obciążany bez odciążania, można napisać $\lambda = t$.

Rozważana tu opcja kinematycznego sterowania może odbywać się z *pełnymi więzami kinematycznymi*, co oznacza, że wszystkie składowe tensora gradientu deformacji $F_{ij}(\lambda)$ są znane i zadawane w postaci funkcji parametru obciążania $\lambda(t)$. Wówczas znana jest pełna informacja o wartości przyrostu gradientu deformacji $\Delta\mathbf{F} = \mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{F}_n$, jaki towarzyszy przejściu między zadanymi punktami (t_n, t_{n+1}) . Przykładem procesu modelowanego z pełnymi więzami kinematycznymi jest proste ścinanie, por. punkt 6.1.1.

Sterowanie kinematyczne deformacją materiału przy *częściowych więzach kinematycznych* umożliwia modelowanie szerszej klasy procesów. W szczególności pozwala modelować jednoosiowe rozciąganie (punkt 6.1.3) bądź ściskanie, próbę kanalikową (punkt 6.2.2) czy ściskanie w p.s.o. (punkt 6.2.2), wszystkie w ramach jednolitego podejścia. Więzy kinematyczne są nakładane częściowo, więc tylko wybrane składowe tensora $\mathbf{F}(\lambda)$ są zadane, a ich wartości znane dla każdego t . Te zadane składowe odpowiadają zewnętrznym więzom lub blokadom nakładanym przez schemat testów deformacji. Pozostałe nieznanne wartości składowych F_{ij} są poszukiwane i nie muszą być ograniczone. Składowe tensora gradientu deformacji są w postaci

$$F_{ij} = \begin{cases} \hat{F}_{ij}(\lambda) & \text{dla } (i, j) \in \hat{z}, \\ \tilde{F}_{ij} & \text{dla } (i, j) \in \tilde{z}, \end{cases} \quad (4.82)$$

gdzie symbole \hat{z} i \tilde{z} oznaczają rozłączne zbiory podwójnych indeksów ij , odpowiednio, zadanych składowych \hat{F}_{ij} i poszukiwanych składowych \tilde{F}_{ij} tensora \mathbf{F} gradientu deformacji. Gradient deformacji można rozłożyć addytywnie z wykorzystaniem składowych (4.82), analogicznie do wzoru (4.75), na część zawierającą zadane $\hat{\mathbf{F}}$ i poszukiwane $\tilde{\mathbf{F}}$ składowe tensora w postaci $\mathbf{F}(\lambda) = \hat{\mathbf{F}}(\lambda) + \tilde{\mathbf{F}}$, por. (4.75) oraz (4.3). W szczególnym przypadku pełnej kontroli kinematycznej gradient $\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}}$, a część poszukiwana $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$.

Jako przykład powyższego rozbicia tensora \mathbf{F} , poniżej podano postać składowych F_{ij} w modelowaniu jednoosiowego rozciągania na kierunku 3 układu współrzędnych, w którym urządzenie obciąża próbkę materiału. W tym przypadku, częściowych więzów kinematycznych, składowe gradientu deformacji \mathbf{F} oraz $\hat{\mathbf{F}}(\lambda)$ i $\tilde{\mathbf{F}}$ można przedstawić w postaci macierzy

$$\mathbf{F}(\lambda) \sim \begin{bmatrix} F_{11} & 0 & 0 \\ F_{21} & F_{22} & 0 \\ F_{31} & F_{32} & \lambda \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{F}}(\lambda) \sim \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{F}} \sim \begin{bmatrix} F_{11} & 0 & 0 \\ F_{21} & F_{22} & 0 \\ F_{31} & F_{32} & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.83)$$

Nałożenie na składowe $F_{13} = F_{23} = 0$ ograniczeń powoduje, że w trakcie deformacji, kierunek 3 rozciągania próbki pozostaje niezmienny, natomiast $F_{12} = 0$ wyklucza dowolny obrót materiału wokół osi rozciągania. Ostatecznie w tensorze deformacji pozostaje

pięć stopni swobody, a sterowanie procesem odbywa się poprzez składową $F_{33} = \lambda$. Iloczyn skalarny tensora gradientu deformacji i naprężenia, w przypadku jednoosiowego rozciągania, można łatwo wyrazić w postaci

$$\mathbf{F}(\lambda) \cdot \mathbf{S} = \lambda S_{33}, \quad \text{gdzie} \quad \mathbf{S} \sim \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{33} \end{bmatrix}. \quad (4.84)$$

Należy zauważyć, że przy częściowych więzach kinematycznych i braku obciążeń zewnętrznych (innych niż reakcje), pełne nasunięcie tensorów $\tilde{\mathbf{F}}$ i $\tilde{\mathbf{S}}$ ma zerową wartość $\tilde{\mathbf{F}} \cdot \tilde{\mathbf{S}} = 0$ (tensory te tworzą ortogonalne kierunki).

4.4 Zastosowanie do modelowania formowania podstruktury w kryształach

Kocks (1960) wskazuje, że interakcje między pierwotnymi i wtórnymi dyslokacjami hamują jednoczesne uruchomienie więcej niż jednego systemu poślizgu w jednym regionie kryształu i w efekcie powodują separację aktywacji poślizgu na regiony pojedynczego poślizgu. Ruchome dyslokacje należące do dwóch sąsiednich aktywnych systemów spotykają się na powierzchni granicznej między regionami pojedynczego poślizgu, gdzie silnie oddziałują w wyniku formowania nieruchomych osiadłych uskoku (progów). Nagromadzenie takich zatrzymanych dyslokacji prowadzi do formowania ścianek dyslokacyjnych.

W kryształach podlegających plastycznym deformacjom jest obserwowany rozwój obszarów o dominującym pojedynczym poślizgu, (Piercy et al., 1955), (Asaro, 1983b) (ang. „patchy slip”). Wg pracy (Piercy et al., 1955), analiza poślizgów podczas badania wzmocnienia utajonego ujawnia trudności, jakie napotyka poślizg pojedynczego systemu w przechodzeniu przez płaszczyzny poślizgu innych aktywnych systemów. Wyniki eksperymentalne ukazują powstawanie oddzielonych obszarów, gdzie dominują poślizgi pojedynczego systemu. Niechęć aktywnych systemów poślizgu do przecinania się wyjaśniona jest trudnościami, jakie pojawiają się, gdy przecinającym się dyslokacjom tworzy powstawanie barier (ang. jog).

W procesie deformacji początkowo jednorodnych kryształów o wzmocnieniu utajonym przyrost energii nie musi być funkcją wypukłą, więc może posiadać lokalne minima odpowiadające kierunkom deformacji realizowanej przy aktywacji pojedynczych systemów poślizgu. Wówczas, uprzywilejowane jest powstawanie podstruktury złożonej lokalnie z podobszarów o aktywnych pojedynczych poślizgach. Rozwój podstruktury jest preferowany w sensie energetycznym, gdyż może oferować energetyczne korzyści w stosunku do deformacji jednorodnej. Wniosek taki wynika z ogólnej analizy minimalizacji niewypukłej energii przyrostowej 2-go rzędu w zagadnieniu przyrostowo nieliniowym, por. (Petryk, 1997a).

W pracy (Ortiz & Repetto, 1999) przyrostowe deformacje niesprężystego ciała (w ramach teorii zależnej od skali czasu) są wyznaczane tak, że minimalizują (nie całkiem jasno zdefiniowaną) pseudosprężystą funkcję gęstości energii. Zasadniczym celem powyższej pracy było sformułowanie zagadnienia wyznaczania struktur dyslokacyjnych jako zadanie minimalizacji niewypukłej pseudosprężystej funkcji gęstości energii kryształu z geometrycznym osłabieniem lub wzmocnieniem utajonym. Efekt geometrycznego

osłabienia dotyczy redukcji wartości wypadkowego naprężenia ścinającego koniecznego do uruchomienia systemu poślizgu w wyniku obrotów sieci, (Asaro, 1983b).

Ortiz et al. (2000) przyjmują jako punkt wyjściowy klasyczny lokalny model plastyczności kryształu, jednakże w postaci lepkiej zależnej od skali czasu t . Przyrostowa praca deformacji jest więc zależna w sposób jawny od przyrostu Δt , co nie występuje w niniejszej rozprawie. Proponowane przez ww. autorów podejście obejmuje model materiału z dodatkowymi stopniami swobody lokalnej deformacji, tak że materiał ma możliwość rozwoju złożonych pól lokalnej deformacji w formie sekwencyjnych laminatów. Model z dodatkowymi stopniami swobody umożliwia deformację materiału z możliwością spontanicznego wyboru „ścieżki najmniejszego oporu”, tzn. rozwój takiej podstruktury, która minimalizuje przyrostową pracę deformacji, (Petryk, 1997a), (Ortiz & Repetto, 1999). Proponowane w pracy (Ortiz et al., 2000) wariacyjne sformułowanie plastyczności kryształów, gdzie podstruktura pojawia się naturalnie jako konsekwencja braku wypukłości funkcjonału energii przyrostowej, nie jest jednak spójne z jednoznacznością odpowiedzi materiału lepkoplastycznego.

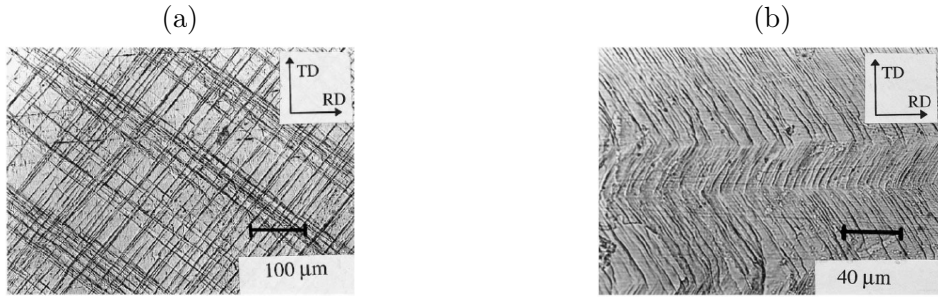
Nowsze prace z zakresu modelowania tworzenia pasm deformacji to (Petryk & Thermann, 2002), (Aubry & Ortiz, 2003), (Aubry et al., 2003), (Mahesh & Tomé, 2004), (Sivakumar & Ortiz, 2004). Podejście przedstawione w pracy (Hackl & Kochmann, 2008) dotyczy przyrostowej minimalizacji funkcjonału energii zrelaksowanego przez wprowadzenie laminacji pierwszego rzędu. Zamieszczone modelowanie ewolucji mikrostruktury jest realizowane przy założeniu pojedynczego poślizgu w sprężysto-plastycznym kryształce oraz laminatu dwufazowego. Warto zaznaczyć, że rozpatrywane w niniejszej pracy tworzenie pasm deformacji jest sprzężone z niejednoznacznością typu konstytutywnego. Jeżeli tensor modułów stycznych (sprężysto-plastycznych) jest jednoznacznie określony, to typowe podejście do określania momentu powstawania i orientacji pasm deformacji (pasm ścinania) polega na wyznaczaniu punktu utraty eliptyczności równań przyrostowych, por. (Hill & Hutchinson, 1975), (Rice, 1977), (Asaro & Rice, 1977), (Asaro, 1979), (Duszek-Perzyna & Perzyna, 1993).

4.4.1 Mikrostruktura w postaci różnie zdeformowanych pasm

Podczas procesu deformacji materiału można obserwować różne powstające i rozwijające się mikrostruktury, por. (Kuhlmann-Wilsdorf, 1999). Wyniki testów eksperymentalnych prowadzonych na początkowo jednorodnym materiale potwierdzają, że mogą powstawać pasma deformacji (ang. deformation bands), por. rys. 4.1. Powstawanie pasm deformacji jest zaobserwowane w próbie kanalikowej lub teście ściskania w płaskim stanie odkształcenia (p.s.o.), por. (Basson & Driver, 2000), (Darrieulat et al., 2007), (Godfrey et al., 1998).

Praca (Wert et al., 2005) zawiera wyniki eksperymentalne ukazujące pasma deformacji obserwowane podczas jednoosiowego rozciągania monokryształu Al o orientacji [110]. Występowanie podziału na podziarna (ang. grain subdivision) jest np. obserwowane w ziarnach rozciąganego polikryształu Cu, por. (Wert & Thorning, 2005).

Modelowanie będzie tu ograniczone do przypadku powstawania pasm deformacji na skutek podziału na podziarna.



Rysunek 4.1: Mikrostruktura obserwowana podczas testu ściskania w p.s.o., wg pracy (Basson & Driver, 2000): ślady płaszczyzn poślizgu plastycznego przy odkształceniu $\varepsilon = 0.09$ (a) oraz pasma deformacji widziane na ściskanej ściance próbki Cu przy odkształceniu $\varepsilon = 0.89$ (b).

4.4.2 Model podziału ziarna w postaci laminatu pierwszego rzędu

Modelowanie procesów niesprężystej deformacji z wystąpieniem zasygnalizowanej powyżej pasmowej struktury jest możliwe poprzez dopuszczenie możliwości podziału ziarna (tj. kryształu) i wprowadzenie dodatkowych stopni swobody określających postać laminatu pierwszego rzędu. Wstępnie jednorodne ziarno będzie rozdrabniane na dwa rodzaje pasmowych podziaren oznaczonych indeksem $s = 1, 2$. Nie jest tu potrzebne wspomniane powyżej ograniczenie, że w każdym obszarze działa tylko jeden system poślizgu.

Makroskopowy stan naprężenia w podzielonym ziarnie określa makroskopowy pierwszy tensor naprężenia Pioli-Kirchhoffa

$$\bar{\mathbf{S}} = \eta_1 \mathbf{S}_1 + \eta_2 \mathbf{S}_2, \quad (4.85)$$

natomiast stan odkształcenia określa makroskopowy gradient całkowitej deformacji

$$\bar{\mathbf{F}} = \eta_1 \mathbf{F}_1 + \eta_2 \mathbf{F}_2. \quad (4.86)$$

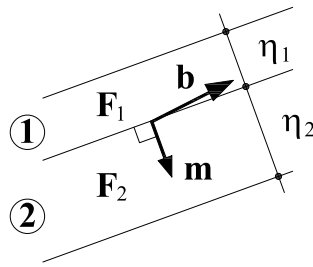
Obie makroskopowe wielkości (4.85) i (4.86) są obliczane w postaci liniowej kombinacji wielkości wyznaczonych dla podziarna s , gdzie parametry $0 \leq \eta_s \leq 1$ określają udziały objętościowe w konfiguracji odniesienia odpowiednio pierwszego ($s = 1$) i drugiego ($s = 2$) rodzaju podziarna, w związku z tym ich suma $\eta_1 + \eta_2 = 1$.

Kinematyczny warunek zgodności deformacji podziaren jest w postaci

$$\mathbf{F}_1 - \mathbf{F}_2 = \mathbf{b} \otimes \mathbf{m}, \quad (4.87)$$

gdzie poszukiwany wektor \mathbf{m} , $|\mathbf{m}| = 1$, określa orientację płaszczyzny rozdziału podziaren, por. rys 4.2. Nieznany wektor \mathbf{b} wyznacza wartość skoku deformacji na płaszczyźnie rozdziału podziaren \mathbf{m} . Zakładamy będziemy, że płaszczyzna rozdziału podziaren jest płaszczyzną materialną, t.j. niepropagującą się względem materiału, oraz że $\mathbf{m} = const$. Szukane przyrosty gradientów deformacji podziaren można łatwo przedstawić przy użyciu warunku (4.87) i związku (4.86) w formie

$$\Delta \mathbf{F}_1 = \Delta \bar{\mathbf{F}} + \eta_2 \Delta \mathbf{b} \otimes \mathbf{m}, \quad \Delta \mathbf{F}_2 = \Delta \bar{\mathbf{F}} - \eta_1 \Delta \mathbf{b} \otimes \mathbf{m}. \quad (4.88)$$



Rysunek 4.2: Schemat mikrostruktury wraz ze stopniami swobody dwu fazowego laminatu pierwszego rzędu.

Można wprowadzić jeden parametr η określający udział objętościowy podziaren, taki że

$$\eta_1 = \eta, \quad \eta_2 = (1 - \eta). \quad (4.89)$$

W przypadku kinematycznego sterowania procesem deformacji, gdy znany jest makroskopowy gradient $\bar{\mathbf{F}}$, wielkości $(\eta, \mathbf{m}$ i $\mathbf{b})$ są niewiadomymi czyli stopniami swobody laminatu, por. rys 4.2.

Rozważmy najpierw zagadnienie czysto sprężyste, gdzie makroskopowa praca odkształcenia laminatu jest w postaci sumy

$$\bar{w} = \eta w_1(\mathbf{F}_1) + (1 - \eta) w_2(\mathbf{F}_2), \quad (4.90)$$

gdzie $w_1(\mathbf{F}_1)$ i $w_2(\mathbf{F}_2)$ oznaczają energię swobodną fazy 1 i 2, a równania konstytutywne faz są w postaci

$$\mathbf{S}_1 = \frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{F}_1}, \quad \mathbf{S}_2 = \frac{\partial w_2}{\partial \mathbf{F}_2}. \quad (4.91)$$

Przypuśćmy, że stan naprężenia w podziarnach spełnia warunki stacjonarności funkcji makroskopowej energii swobodnej laminatu \bar{w} względem stopni swobody \mathbf{b} , \mathbf{m} i η . Warunek stacjonarności funkcji \bar{w} względem wektora \mathbf{b} można wyznaczyć przy pomocy pochodnej obliczanej jako $\frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{b}} = \mathbf{S}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{b}} = (1 - \eta)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{m}$, wyznaczonej przy użyciu wzorów (4.86), (4.87) i (4.89). Analogicznie można wyznaczyć pochodną $\frac{\partial \bar{w}_2}{\partial \mathbf{b}}$, a następnie warunek stacjonarności

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial \mathbf{b}} = \eta(1 - \eta)(\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2) \cdot \mathbf{m} = 0. \quad (4.92)$$

Można zauważyć, że skalarny człon $\frac{1}{2} \geq \eta(1 - \eta) > 0$, gdy udział objętościowy $0 < \eta < 1$. Powyższy warunek narzuca ciągłość naprężeń wypadkowych na płaszczyźnie rozdziału \mathbf{m} laminatu.

Stacjonarność funkcji \bar{w} względem wersora \mathbf{m} jest wyznaczana przy pomocy pochodnej w postaci $\frac{\partial w_1}{\partial \mathbf{m}} = \mathbf{S}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \mathbf{m}} = (1 - \eta)\mathbf{b} \cdot \mathbf{S}_1$ (oraz analogicznej pochodnej $\frac{\partial \bar{w}_2}{\partial \mathbf{m}}$), skąd wynika warunek

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial \mathbf{m}} = \eta(1 - \eta)(\mathbf{b} \cdot (\mathbf{S}_1 - \mathbf{S}_2)) \times \mathbf{m} = 0. \quad (4.93)$$

Warunek stacjonarności funkcji \bar{w} (4.90) względem parametru η jest w postaci

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial \eta} = (w_1 - w_2) - \bar{\mathbf{S}} \cdot (\mathbf{b} \otimes \mathbf{m}) = 0, \quad (4.94)$$

gdzie potrzebna pochodna energii swobodnej w_1 fazy 1 jest w postaci $\frac{\partial w_1}{\partial \eta} = \mathbf{S}_1 \cdot \frac{\partial \mathbf{F}_1}{\partial \eta} = -\mathbf{S}_1 \cdot (\mathbf{b} \otimes \mathbf{m})$ (analogiczną postać ma pochodna $\frac{\partial w_2}{\partial \eta}$).

4.4.3 Zastosowanie przyrostowej minimalizacji energii w modelowaniu podziału ziarna

W przypadku sprężysto-plastycznej deformacji ziarna, zamiast minimalizacji energii swobodnej jak powyżej, należy zastosować minimalizację całkowitej energii przyrostowej uwzględniającą również dyssypację, por. (4.76).

W procesach sterowanych kinematycznie, gdy znika energia potencjalna urządzenia obciążającego \mathcal{F} , przyrost energii $\Delta\bar{w}$ dostarczanej do laminatu jest w postaci kombinacji liniowej przyrostów pracy odkształcania podziaren, Δw_1 i Δw_2 ,

$$\Delta\bar{w} = \eta \Delta w_1 + (1 - \eta) \Delta w_2, \quad (4.95)$$

gdzie przyrost energii podziarna s jest w postaci

$$\Delta w_s = \frac{1}{2}(\mathbf{S}_{s,n} + \mathbf{S}_{s,n+1}) \cdot \Delta \mathbf{F}_s - \frac{1}{2} \sum_K^{n_s} (f_{s,n}^K + f_{s,n+1}^K) \Delta \gamma_s^K + o((\Delta t)^2). \quad (4.96)$$

Dla zadanej deformacji makroskopowej $\bar{\mathbf{F}}(\lambda(t))$ na skończonym kroku obciążania (t_n, t_{n+1}) , przyrosty ścinania $\Delta\gamma_1^K$ i $\Delta\gamma_2^L$ podziaren, udział objętościowy η oraz wektory \mathbf{b} i orientację wersora \mathbf{m} , wyznaczamy, rozwiązując zadanie minimalizacji przyrostu energii całkowitej $\Delta\bar{w}$ z ograniczeniami nierównościami nakładanymi niezależnie na wartości przyrostów ścinania $\Delta\gamma_1^K \geq 0$, $\Delta\gamma_2^L \geq 0$ podziaren nr 1 i 2 oraz na wartość udziału objętościowego $0 \leq \eta \leq 1$.

Minimalizację energii przyrostowej dla laminatu pierwszego rzędu i przy pełnych więzach kinematycznych można przedstawić w formie zagadnienia:

dla danego $\Delta\bar{\mathbf{F}}$ oblicz	$\min_{\mathbf{x}} \Delta\bar{w}$	przy ograniczeniach:	(4.97)
		$\Delta\gamma_1^K \geq 0, \Delta\gamma_2^L \geq 0$	
		$0 \leq \eta \leq 1$	

gdzie symbol $\mathbf{x} = (\Delta\gamma_1^K, \Delta\gamma_2^L, \Delta\mathbf{b}; \eta, \mathbf{m})$ oznacza niewiadome.

W niniejszej rozprawie nie są modelowane zmiany wartości udziału objętościowego η i orientacji płaszczyzny rozdziału \mathbf{m} podczas deformacji materiału. Na początku deformacji, wartość udziału objętościowego η oraz wersor orientacji \mathbf{m} są obliczane tylko raz dla danego procesu deformacji. Możliwe jest rozszerzenie analizy na zmienną wartość η , dalszy podział podziaren, uwzględnienie energii granic rozdziału, itd., co będzie przedmiotem dalszych badań, lecz nie wchodziło w zakres rozprawy.

Rozdział 5

Algorytmy przyrostowej minimalizacji energii

Modelowanie i numeryczne rozwiązywanie zagadnień plastycznych deformacji kryształów, z powodu występującej anizotropii, wzmocnienia utajonego i niejednoznaczności odpowiedzi materiału nie jest zadaniem łatwym. Dodatkowo zagadnienie komplikuje występowanie dużych deformacji i nieliniowość opisu kinematyki. W kryształach jest wiele systemów poślizgu plastycznego, a każdy z nich przekłada się na pojedynczą powierzchnię plastyczności. Układ równań zagadnienia stwarza możliwość występowania niejednoznaczności wyznaczania zbioru systemów aktywnych, por. (Hill, 1966; Kocks, 1970).

W celu przezwyciężenia trudności wynikających z niejednoznaczności rozwiązania, prace (Peirce et al., 1982, 1983; Asaro & Needleman, 1985) wykorzystywały sformułowanie zależne od skali czasu z lepko-plastyczną regularyzacją oryginalnego niezależnego od skali czasu sformułowania modelu sprężysto-plastycznego. Technikę numerycznej regularyzacji stosowano, nawet jeśli fizyczne efekty zależne od skali czasu były znikomo małe. Sformułowania zależne od skali czasu bazują często na potęgowym prawie poślizgu lepko-plastycznego, bez podziału na systemy aktywne i nieaktywne. Lepko-plastyczna regularyzacja usuwa problem niejednoznaczności rozwiązania, a w granicy dla bardzo małej wartości parametru regularyzacyjnego (ang. rate-sensitivity parameter) daje przybliżenie niezależne od skali czasu. W przypadku przyjęcia parametru regularyzacyjnego o małych wartościach, tak aby otrzymać przybliżenie niezależne od skali czasu, mogą pojawić się trudności w rozwiązywaniu układu. „Sztywność” numerycznie całkowanego układu równań utrudnia skonstruowanie efektywnego algorytmu obliczeniowego. Numeryczne całkowanie sztywnych układów równań może powodować niestabilności rozwiązania.

Późniejsze prace (Kalidindi et al., 1992) i (Rashid & Nemat-Nasser, 1992) zawierają metody rozwiązywania z lepko-plastyczną regularyzacją przy zastosowaniu schematu jawnego, por. (Maniatty et al., 1992). Natomiast w pracy (Cuitiño & Ortiz, 1992) przedstawiono algorytm rozwiązywania bazujący na niejawnym schemacie całkowania.

Borja & Wren (1993) wykorzystują podejście niezależne od skali czasu w zastosowaniu do małych odkształceń, gdzie schemat całkowania związków konstytutywnych jest z podziałem na etap próbny oraz etap korygujący, który jest wykonywany wraz z poszukiwaniem systemów aktywnych. W pracach (Miehe, 1996a) oraz (Miehe, 1996b) zastosowano niejawny schemat całkowania związków konstytutywnych w zakresie du-

zych deformacji oraz propozycję poszukiwania zbioru systemów aktywnych. Algorytmy wykorzystujące podejście niezależne od skali czasu można znaleźć w pracach (Anand & Kothari, 1996; Knockaert et al., 2000; Schröder & Miehe, 1997) i monografii (Simo & Hughes, 1998), a także w pracy (Neto et al., 2008). Przegląd i porównanie algorytmów zależnych i niezależnych od skali czasu zawiera praca (Miehe & Schröder, 2001), gdzie przedstawiono techniki rozwiązywania źle uwarunkowanego układu równań, które wykorzystują metodę uogólnionej macierzy odwrotnej (ang. generalized inverse).

W pracy (Schmidt-Baldassari, 2003) przedstawiono alternatywne podejście wynikające z zasady maksymalnej dyssypacji. Algorytm obliczeniowy zbudowano przy zastosowaniu niejawnego schematu całkowania oraz metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a.

Niniejszy rozdział zawiera opis własnych algorytmów numerycznej minimalizacji energii przyrostowej na skończonym kroku obciążania. Algorytmy obliczeniowe dotyczą minimalizacji energii przyrostowej stosowanej w zagadnieniach sprężysto-plastycznych deformacji kryształów przy użyciu modelu niezależnego od skali czasu. Modelowane procesy są quasi-statyczne oraz sterowane kinematycznie. Przyrostowa minimalizacja energii jest wykonywana przy ustalonej długości kroku czasowego ($t_n, t_{n+1} = t_n + \Delta t$), a zadawana część gradientu deformacji jawnie zależy od parametru obciążania λ . Powyższe podejście jest odmienne od metody numerycznego całkowania równań lokalnego zagadnienia deformacji niezależnej od skali czasu i rozwiązywania wprost zlinearyzowanego układu równań.

5.1 Sformułowanie minimalizacji energii przyrostowej na skończonym kroku

W ciągłym zagadnieniu konstytutywnym dla danych wartości początkowych w chwili $t = 0$ oraz historii deformacji dla $t \in [0, T]$ poszukiwany jest przebieg funkcji określających stan deformacji i naprężenia. W ogólności przy złożonych ścieżkach, odpowiadających rzeczywistym procesom deformacji materiału, nieznanne są analityczne rozwiązania zagadnienia początkowego zdefiniowanego przez sprężysto-plastyczne związki konstytutywne modelu. Niedostępność rozwiązań analitycznych wymusza stosowanie numerycznych technik obliczania rozwiązań przybliżonych. W klasycznych podejściach, omówionych we wstępie niniejszego rozdziału, rozwiązanie jest wyznaczane z warunku (2.33), przy spełnieniu związków konstytutywnych (2.45, 2.46, 2.32).

W celu minimalizacji energii przyrostowej, zdefiniowanej dla modelu kryształu zależnego od ścieżki deformacji (ang. path-dependent material) przez wielkości wyrażone w prędkościach, por. (2.45), (2.46), (2.32), wprowadzono schemat numerycznej minimalizacji dla skończonego kroku obciążania. Schemat numerycznej minimalizacji energii przyrostowej zamienia ciągle zagadnienie wyrażone w prędkościach na zagadnienie wyrażone w przyrostach o skończonych długościach Δt . Algorytm minimalizacji energii przyrostowej jest skonstruowany przy zastosowaniu pseudoczasowej dyskretyzacji oraz przyjęciu charakteru ścieżki deformacji między dwoma przyległymi chwilami (punktami t_n i t_{n+1} na ścieżce). W punkcie t_n znany jest stan naprężenie i zmienne wewnętrzne, a na kroku (t_n, t_{n+1}) zadana jest częściowo deformacja. Przy ustalonym przedziale czasu (t_n, t_{n+1}) algorytm minimalizacji umożliwia obliczanie wartości naprężenia i zmiennych

wewnętrznych dla punktu t_{n+1} .

W celu pokonania trudności związanej z niejednoznacznością rozwiązania, klasyczne przyrostowe sprężysto-plastyczne zagadnienie konstytutywne będzie zastąpione zagadnieniem minimalizacji energii przyrostowej $\Delta E_{\mathcal{L}}$ (4.40) dostarczanej do złożonego układu \mathcal{L} . W przypadku modelowania procesu jednorodnej deformacji minimalizowana energia przyrostowa jest w postaci (4.71), (4.76) lub (4.80). Natomiast gdy modelowanie uwzględnienia możliwość podziału ziarna energia przyrostowa jest w postaci (4.95).

Zagadnienie dla skończonego kroku deformacji

Rozwiązywanie zagadnienia polega na wyznaczeniu wartości podstawowych zmiennych dla punktu t_{n+1} , gdy zadany jest przyrost Δt . Przyrosty wielkości poszukiwanych i zadanych na odcinku (t_n, t_{n+1}) oznaczono symbolem

$$\Delta(\cdot) = (\cdot)_{n+1} - (\cdot)_n, \quad (5.1)$$

gdzie wartości z chwili t_n są traktowane jako znane.

Wartości przyrostów naprężenia $\Delta \mathbf{S}(\Delta \gamma^K, \Delta \tilde{\mathbf{F}})$ i przyrostów funkcji plastyczności $\Delta f^K(\Delta \gamma^K, \Delta \tilde{\mathbf{F}})$ są wyznaczone po scałkowaniu na długości kroku (t_n, t_{n+1}) równań (2.45 i 2.46). Związki konstytutywne dla skończonego przyrostu deformacji (t_n, t_{n+1}) można przedstawić przy pomocy numerycznego schematu całkowania w postaci

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{S} &= \mathbf{S}_{n+1} - \mathbf{S}_n = \mathbb{A}_{n+\theta} \cdot \Delta \mathbf{F} - \sum_{L=1}^{m_S} \mathbf{A}_{n+\theta}^L \Delta \gamma^L, \\ \Delta f^K &= f_{n+1}^K - f_n^K = \mathbf{A}_{n+\theta}^K \cdot \Delta \mathbf{F} - \sum_{L=1}^{m_S} g_{n+\theta}^{KL} \Delta \gamma^L. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Na początku przyrostowego kroku deformacji (w punkcie t_n) znane są wartości naprężenia \mathbf{S}_n , funkcji plastyczności f_n^K , a także deformacji (z rozbięciem na część sprężystą i plastyczną) i zbioru aktywnych systemów poślizgu. Niewiadome na każdym kroku to przyrosty ścinania oraz częściowo przyrost gradientu deformacji: $(\Delta \gamma^K, \Delta \tilde{\mathbf{F}})$.

Równania w formie przyrostowej (5.2) przedstawiono z parametrem $0 \leq \theta \leq 1$, który określa schematu numerycznego całkowania. W punkcie $t_{n+\theta}$, z przedziału (t_n, t_{n+1}) , wyznaczone są wielkości $\mathbb{A}_{n+\theta}$, $\mathbf{A}_{n+\theta}^K$, $g_{n+\theta}^{KL}$. Wielkości $\mathbb{A}_{n+\theta}$, $\mathbf{A}_{n+\theta}^K$, $g_{n+\theta}^{KL}$ mogą być wyznaczone w postaci liniowej kombinacji ich wartości z początku t_n i końca t_{n+1} przedziału całkowania (ang. generalized classical trapezoidal rule) lub w postaci funkcji zależnych do wielkości obliczanych jako liniowe kombinacje (ang. generalized midpoint rule). Wybór wartości parametru θ ma wpływ na stabilność i zbieżności schematu numerycznego całkowania. W przypadku gdy parametr $\theta = 1$ schemat całkowania (5.2) jest nazywany niejawnym (ang. backward Euler, fully implicit), (Simo & Hughes, 1998), (Neto et al., 2008). Przy konstruowaniu algorytmów obliczeniowych stosowano niejawnym schemat numerycznego całkowania.

Nieznane przyrosty $\Delta \gamma^K$ ścinania są wyznaczone *przy ograniczeniach w postaci warunku aktywacji* (2.32). Ograniczenia są nakładane dyskretnie w chwilach t_{n+1} (czyli na końcu kroku przyrostowej deformacji)

$$\Delta \gamma^K \geq 0, \quad f_{n+1}^K \leq 0, \quad \Delta \gamma^K f_{n+1}^K = 0 \quad (\text{nie sumować po } K). \quad (5.3)$$

Powyższa postać ograniczeń wynika, jak wykazano powyżej, z warunków Kuhna-Tuckera dla zagadnienia minimalizacji (4.74) przy ograniczeniach konstytutywnych (4.64) i (4.66).

Algorytmy obliczeniowe zamieszczone w niniejszym rozdziale dotyczą modelowania procesów ze sterowaniem kinematycznym realizowanym przez zadawanie wartości niektórych składowych tensora całkowitego gradientu deformacji \mathbf{F} względem globalnego układu (w małych odkształceniach będą to składowe tensora odkształcenia ε). Sterowanie procesem deformacji odbywa się przy *pełnych lub częściowych więzach kinematycznych*. Pojęcie pełnych więzów kinematycznych oznacza, że w kolejnych krokach t_{n+1} dana jest całkowita informacja o tensorze \mathbf{F} . W przypadku częściowych więzów tylko wybrane składowe tensora gradientu deformacji są kontrolowane, pozostałe stanowią część rozwiązania $\tilde{\mathbf{F}}$ i są traktowane jako niewiadome. W algorytmach obliczeniowych uwzględniono również dodatkowe stopnie swobody, ponad te wynikające z częściowych więzów kinematycznych. Wprowadzenie dodatkowych stopni swobody umożliwia numeryczne symulacje procesu podziału ziarna.

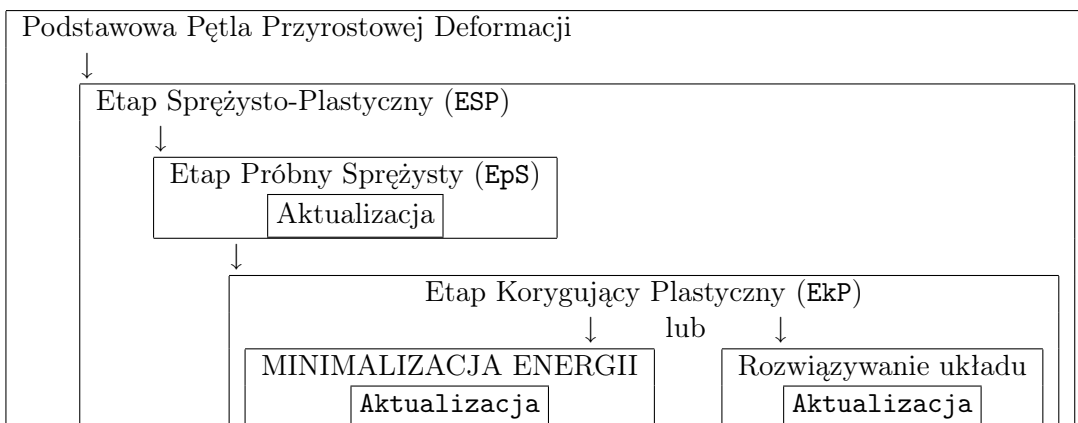
Całkowanie równania plastycznej deformacji

W przypadku nieliniowych zagadnień, takich jak plastyczność kryształu, pojawia się potrzeba obliczania *funkcji eksponencjalnej argumentu tensorowego*. Zastosowanie w algorytmie obliczeniowym numerycznie scałkowanego równania prędkości plastycznej deformacji (2.10) wymaga użycia funkcji eksponencjalnej. Argument funkcji eksponencjalnej jest w postaci przyrostu plastycznego płynięcia. W szczególnym przypadku, gdy prędkość argumentu tensorowego ma stałą wartość na kroku całkowania, metoda daje ścisły wynik. Funkcja eksponencjalna w algorytmie obliczeniowym jest przybliżona jej rozwinięciem w szereg potęgowy. Aby w obliczeniach uzyskać założoną numeryczną dokładność wystarczy uwzględnić kilka pierwszych członów rozwinięcia.

Rozwiązanie zagadnienia przyrostowego z podziałem na próbny etap sprężysty oraz korygujący etap plastyczny

Etap sprężysto-plastyczny (tutaj oznaczony jako ESP) to procedura wyznaczania wartości przyrostów poszukiwanych zmiennych na ustalonym kroku procesu deformacji. Etap ESP jest rozbity na dwa następujące po sobie etapy, pierwszy to próbny etap sprężysty (w skrócie EpS, ang. „Elastic Predictor”), drugi to korygujący etap plastyczny (w skrócie EkP, ang. „Plastic Corrector”), por. tab. 5.1 .

Tablica 5.1: Blokowa struktura algorytmu przyrostowej deformacji.



W algorytmie obliczeniowym procesu deformacji kryształu można wydzielić integralne bloki, por. tab. 5.1. W podstawowej pętli przyrostowej deformacji zadawany jest gradient deformacji w układzie globalnym i wykonywany etap sprężysto-plastyczny (ESP). Etap ESP jest podzielony na dwa bloki, etap EpS jest wykonywany zawsze, natomiast etap EkP jest wykonywany jeżeli próbny stan naprężenia przekroczy powierzchnię plastyczności. Na etapie EkP wyznaczane są poszukiwane przyrosty przy użyciu minimalizacji energii przyrostowej lub poprzez rozwiązywanie zlinearyzowanego układu równań. W etapach EpS i EkP wykonywana jest aktualizacja szukanych wartości dla końca kroku deformacji.

Poszukiwanie zbioru aktywnych systemów poślizgu

Zbiór aktywnych systemów poślizgu \mathcal{A} (2.34), w modelu kryształu z wieloma systemami, nie jest w ogólności znany na przyrostowym kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) . Z powodu dużej liczby systemów, które potencjalnie mogą zostać aktywowane, procedura polegająca na przeszukiwaniu wszystkich możliwych kombinacji jest obliczeniowo nieefektywna. Dla ustalonego zbioru aktywnych systemów poślizgu \mathcal{A} może istnieć wiele kombinacji przyrostów ścinania, które dają identyczny przyrost plastycznej części gradientu deformacji. Trudność wynika z faktu, że zbiór systemów aktywnych spełniających dyskretne warunki zgodności nie musi być jednoznacznie określony. Niejednoznaczność rozwiązania jest możliwa, ponieważ diady $\mathbf{m}^K \otimes \mathbf{n}^K$ wszystkich systemów poślizgu nie są liniowo niezależne.

Przy określaniu zbioru aktywnych systemów poślizgu istotną rolę odgrywają dwa punkty algorytmu. Dla zadanego przyrostu deformacji, jeszcze przed startem algorytmu obliczania przyrostów ścinania, należy ustalić (w pewnym sensie odgadnąć) początkowy zbiór systemów aktywnych. Natomiast w trakcie kolejnych iteracji algorytmu (na jednym kroku deformacji), wraz z obliczaniem przyrostów ścinania należy równocześnie aktualizować zbiór systemów aktywnych. Nie jest oczywiste jak ustalać początkowy zbiór systemów aktywnych, a następnie wykonywać jego aktualizację. Natomiast na końcu kroku deformacji wyznaczony zbiór systemów aktywnych musi spełnić przyrostowe warunki aktywacji (5.3).

W pracy (Borja & Wren, 1993) zaproponowano algorytm selekcji systemów aktywnych, gdzie zbiór początkowy dla etapu EkP to zbiór systemów aktywnych obliczony na końcu poprzedniego kroku deformacji. W alternatywnym podejściu zaproponowanym wg pracy (Miehe, 1996b), zbiór początkowy dla etapu EkP jest przyjmowany jako zbiór próbny wyznaczony na podstawie próbnych wartości funkcji plastyczności obliczonych na etapie EpS.

Zgodnie z podejściem przedstawionym w pracach (Cuitiño & Ortiz, 1992), (Borja & Wren, 1993), (Simo & Hughes, 1998) po rozwiązywaniu układu równań i wyznaczeniu nowych wartości przyrostów ścinania, z rozwiązania zostają odrzucone systemy o ujemnych przyrostach ścinania. Metoda eliminacji systemów, w trakcie iteracyjnego rozwiązywania zlinearyzowanego układu równań, może powodować niestabilności rozwiązania, por. podrozdział 5.3.3.

Na podstawie obliczonych wartości przyrostów ścinania i funkcji plastyczności, na całym kroku deformacji, określany zostaje aktualny zbiór systemów poślizgu. Wg pracy (Borja & Wren, 1993) ten zbiór to suma zbioru systemów, gdzie przyrosty ścinania są dodatnie i zbioru systemów, gdzie funkcje plastyczności są dodatnie. Zbiór systemów

o dodatnich wartościach funkcji plastyczności jest pusty dla rozwiązania spełniającego dyskretne warunki aktywacji (5.3).

Linearyzacja zagadnienia przyrostowego

W niniejszej pracy na etapie EkP wykonywana jest minimalizacja energii przyrostowej przy zastosowaniu linearyzacji i przyrostów korygujących. Stosowana tu technika nawiązuje do metody linearyzacji nieliniowych związków konstytutywnych wyrażonych w przyrostach (ang. cutting-plane algorithm wg pracy (Simo & Hughes, 1998)).

Jeśli na skończonym kroku deformacji poszukiwane są przyrosty całkowite $\Delta \mathbf{x} = (\Delta \gamma^K, \Delta \tilde{\mathbf{F}})$, to w wyniku linearyzacji, zagadnienie minimalizacji jest rozwiązywane w iteracyjnej pętli względem przyrostów drugiego rzędu $\Delta^2 \mathbf{x}$. Przyrosty drugiego rzędu $\Delta^2 \mathbf{x}$ to iteracyjne przyrosty korygujące. Na etapie EkP stosowany jest iteracyjny schemat przyrostowej minimalizacji energii, gdzie obliczane jest przybliżenie $(m + 1)$

$$\Delta \mathbf{x}_{m+1} = \Delta \mathbf{x}_m + \Delta^2 \mathbf{x}, \quad (5.4)$$

poszukiwanego rozwiązania $\Delta \mathbf{x}$ na końcu kroku t_{n+1} . Iteracyjny schemat wyznaczania plastycznego etapu korygującego (EkP) jest wykonywany wraz ze sprawdzaniem dyskretnych warunków aktywacji (5.3).

5.2 Zastosowanie metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a

W celu efektywnego rozwiązania zadania minimalizacji energii przyrostowej Δw zastosowano metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a wg prac (Nocedal & Wright, 1999), (Bertsekas, 2003). Metoda rozszerzonych mnożników Lagrange'a jest stosowana w zagadnieniach optymalizacji i umożliwia poszukiwanie lokalnego minimum (lub maksimum) funkcji z ograniczeniami równościowymi i nierównościowymi narzucanymi na poszukiwany wektor $\Delta \mathbf{x}$,

$$\min_{\Delta \mathbf{x}} \Delta w(\Delta \mathbf{x}) \quad \text{z ograniczeniami} \quad \begin{cases} r^K(\Delta \mathbf{x}) = 0, & K \in \mathcal{R}, \\ n^L(\Delta \mathbf{x}) \geq 0, & L \in \mathcal{N}. \end{cases} \quad (5.5)$$

W zagadnieniu plastyczności kryształu występują ograniczenia nierównościowe $n^L(\Delta \mathbf{x}) \geq 0$ z pominięciem ograniczeń równościowych $r^K(\Delta \mathbf{x}) = 0$.

Stosowana tu metoda minimalizacji jest połączeniem klasycznej metody Lagrange'a z najprostszą wersją metody funkcji kary przy zastosowaniu funkcji kwadratowej (Nocedal & Wright, 1999). Minimalizowana funkcja różni się od standardowego Lagrangianu członem kwadratowym, równocześnie różni się od metody kwadratowej funkcji kary członem zawierającym sumowanie po mnożnikach Lagrange'a, por. (5.6). Jawne użycie mnożników Lagrange'a wprowadzonych do minimalizowanej funkcji umożliwia uniknięcie złego uwarunkowania, które jest cechą metody kwadratowej funkcji kary, w przypadku gdy parametr kary zbiega do małych wartości. Metoda rozszerzonych mnożników Lagrange'a nie wprowadza nieciągłości (w odróżnieniu od metody ścisłej funkcji kary), a jej implementacja może być wykonana przy zastosowaniu standardowych algorytmów optymalizacji bez ograniczeń. Natomiast parametr kary $\mu > 0$ nie musi przyjmować małych wartości.

Metoda rozszerzonych mnożników Lagrange'a należy do klasy metod poszukiwania rozwiązania optymalizacji z ograniczeniami, gdzie rozwiązanie jest otrzymywane po zamianie oryginalnego zadania optymalizacji z ograniczeniami (5.5) na ciąg podzadań bez ograniczeń. Początkowe sformułowanie z ograniczeniami nierównościami $n_L(\mathbf{x}) \geq 0$, $L \in \mathcal{N}$ jest zamieniane na sformułowanie z ograniczeniami równościami przy wprowadzeniu zmiennych s^L (ang. slack variables), tak że $n^L(\mathbf{x}) - s^L = 0$, $s^L \geq 0$, $L \in \mathcal{N}$.

Minimalizacja energii przyrostowej w procesie deformacji kryształu wymaga wprowadzenia niewiadomych $\Delta \mathbf{x} = [\Delta \gamma^K]$, ograniczeń $n^L(\Delta \mathbf{x}) = \Delta \gamma^L$ oraz zbioru $\mathcal{N} = \mathcal{P}$ (przypuszczalnie aktywnych systemów). Zadanie (5.5) przyjmuje postać

$$\min_{(\Delta \gamma^K, s^K \geq 0, K \in \mathcal{P})} \Delta w(\Delta \gamma^K) - \sum_{K \in \mathcal{P}} \lambda^K (\Delta \gamma^K - s^K) + \frac{1}{2\mu} \sum_{K \in \mathcal{P}} (\Delta \gamma^K - s^K)^2. \quad (5.6)$$

Alternatywą do jawnego uwzględnienia ograniczeń nierównościami bezpośrednio w podzadaniu (5.6) jest eliminacja zmiennych s^K . Wartości zmiennych $s^L = \max(\Delta \gamma^L - \mu \lambda^L, 0)$ zostały wyznaczone jako rozwiązania optymalne podzadania (5.6), gdzie minimalizowana funkcja jest wypukła względem s^K .

Wartości przyrostów ścinania $\Delta \gamma^L$ będą wyznaczone w pętli, której kolejne iteracje są oznaczone indeksem k . W zerowej iteracji ($k = 0$) należy ustalić początkowe wartości parametru $\mu_{k=0}$ (np. 10^{-1}), mnożników $\lambda_{k=0}^L$ i przyrostów $\Delta \gamma_{k=0}^L$. Zbiór przypuszczalnie aktywnych systemów \mathcal{P} jest identyczny dla wszystkich iteracji k . W iteracji k dla znanych wartości parametru μ_k i mnożników λ_k^K wyznaczone są przyrosty $\Delta \gamma^L$:

$$\min_{(\Delta \gamma^L, L \in \mathcal{P})} \mathcal{L}_{AL}(\Delta \gamma^L, \lambda^L, \mu), \quad \text{gdzie } \mathcal{L}_{AL} = \Delta w(\Delta \gamma^L) + \sum_{L \in \mathcal{P}} \psi(\Delta \gamma^L, \lambda^L, \mu). \quad (5.7)$$

Dla iteracji k funkcja ψ przyjmuje wartość

$$\psi(\Delta \gamma^L, \lambda^L, \mu) = \begin{cases} -\lambda^L \Delta \gamma^L + \frac{1}{2\mu} (\Delta \gamma^L)^2 & \text{jeśli } \Delta \gamma^L - \mu \lambda^L \leq 0, \\ -\frac{\mu}{2} (\lambda^L)^2 & \text{w przeciwnym wypadku.} \end{cases} \quad (5.8)$$

Po wyznaczeniu nowych wartości przyrostów $\Delta \gamma_{k+1}^L$ obliczane są aktualne wartości mnożników Lagrange'a

$$\lambda_{k+1}^L = \max(\lambda_k^L - \Delta \gamma_k^L / \mu_k, 0), \quad L \in \mathcal{P}, \quad (5.9)$$

oraz wartości parametru kary $\mu_{k+1}^L \in (0, \mu_k^L)$, który zmienia się liniowo

$$\mu_{k+1} = c \mu_k. \quad (5.10)$$

Stała c ma małą wartość (np. 10^{-3}). Przerwanie obliczeń w pętli następuje, gdy obliczone wartości przyrostów $\Delta \gamma_{k+1}^L$ spełniają warunek

$$|[\Delta \gamma_{k+1}^L] - [\Delta \gamma_k^L]| \leq \epsilon_{\text{TOLE}}, \quad L \in \mathcal{P}. \quad (5.11)$$

5.3 Algorytm minimalizacji w przypadku jednorodnej deformacji z pełnymi więzami kinematycznymi

Oznaczenia reprezentacji macierzowej

W celu uproszczenia zapisu macierzowego stosowanego w opisie algorytmów obliczeniowych umieszczonych poniżej, wprowadzono oznaczenie $[\cdot]$ dla „pionowej” listy lub

macierzy oraz $\{\cdot\}$ dla „poziomej” listy. W niniejszym rozdziale pojęcie listy jest używane zamiennie z pojęciem wektora, obydwa oznaczają macierz o jednym wierszu lub jednej kolumnie.

Niesymetryczne miary naprężenia i deformacji, por. (2.45) i (2.46), występujące w modelu kryształu wymuszają stosowanie w algorytmie obliczeniowym, reprezentacji składowych tensora 2-go rzędu w postaci wektora o dziewięciu elementach. Składowe T_{ij} niesymetrycznego tensora \mathbf{T} drugiego rzędu są przedstawiane w postaci wektora $[T_{ij}]_{(9)}$ lub poziomej listy $\{T_{ij}\}_{(9)}$ o dziewięciu elementach

$$\{T_{ij}\}_{(9)} = \{T_{11} \ T_{22} \ T_{33} \ T_{23} \ T_{13} \ T_{12} \ T_{32} \ T_{31} \ T_{21}\}, \quad (5.12)$$

oraz jako kwadratowa macierz $[T_{ij}]_{(3 \times 3)}$ (lub $[\mathbf{T}]_{(3 \times 3)}$) w postaci

$$[T_{ij}]_{(3 \times 3)} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix}. \quad (5.13)$$

W przypadku symetrycznego tensora $\mathbf{T} = \mathbf{T}^T$ drugiego rzędu, z wykorzystaniem notacji Kelvina (Cowin & Mehrabadi, 1995), składowe T_{ij} przedstawiane są w postaci wektora $[T_{ij}]_{(6)}$ lub poziomej listy $\{T_{ij}\}_{(6)}$ o sześciu elementach

$$\{T_{ij}\}_{(6)} = \left\{ T_{11} \ T_{22} \ T_{33} \ \sqrt{2}T_{23} \ \sqrt{2}T_{13} \ \sqrt{2}T_{12} \right\}. \quad (5.14)$$

W tablicach 5.2, 5.5, 5.10 oraz 7.2, zawierających algorytmy obliczeniowe zastosowano oznaczenie wektora (5.12) o dziewięciu elementach w postaci $\mathbf{MtoV9}(\) = [\]_{(9)}$ oraz macierzy (5.13) o wymiarze (3×3) w postaci $\mathbf{V9toM}(\) = [\]_{(3 \times 3)}$. Symbol $\mathbf{1}_{(3 \times 3)}$ oznacza diagonalną jednostkową macierz, natomiast $\mathbf{0}_{(3 \times 3)}$ oznacza macierz zerową.

Początkowa orientacja kryształu

Kryształy są zarówno sprężyste jak i plastycznie anizotropowe, więc odpowiedź materiału w naprężeniach istotnie zależy od początkowej orientacji sieci krystalograficznej względem układu obciążania. W celu wyznaczenia początkowej orientacji sieci kryształu wprowadzono dwa układy współrzędnych kartezjańskich. Z początkową orientacją sieci pojedynczego kryształu związany jest kartezjański układ współrzędnych K_C o ortonormalnej bazie $\{\mathbf{e}_i\}$, gdzie indeks $i = 1, 2, 3$. Natomiast deformacja kryształu zadawana jest przy użyciu urządzenia obciążającego względem globalnego układu współrzędnych \bar{K}_S o ortonormalnej bazie $\{\bar{\mathbf{e}}_i\}$. Globalny układ \bar{K}_S został związany z laboratoryjnymi kierunkami makroskopowej próbki materiału. Dwa niezależne układy współrzędnych umożliwiają ustalanie początkowej orientacji sieci kryształu przy ustalonym schemacie obciążania próbki.

Transformacja między układami współrzędnych K_C i \bar{K}_S odbywa się przy użyciu macierzy obrotu

$$[\mathbf{Q}^R] = [\mathbf{Q}^R](\varphi_1, \Phi, \varphi_2), \quad (5.15)$$

gdzie wartości trzech kątów Eulera $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ określają stałą w całym procesie deformacji wartość macierzy $[\mathbf{Q}^R]$, por. (Bunge, 1982), (Dłużewski, 1996).

Gradient deformacji \mathbf{F} ma reprezentację \bar{F}_{ij} względem globalnego układu \bar{K}_S oraz reprezentację F_{ij} względem układu K_C . Powyższe reprezentacje można przedstawić w

postaci macierzy $[\bar{\mathbf{F}}]$ oraz $[\mathbf{F}]$. Transformacja składowych tensora gradientu deformacji między bazami $\{\bar{\mathbf{e}}_k\}$ i $\{\mathbf{e}_i\}$,

$$\mathbf{F} = F_{ij} \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j = \bar{F}_{kl} \bar{\mathbf{e}}_k \otimes \bar{\mathbf{e}}_l, \quad (5.16)$$

jest wyznaczona przy użyciu macierzy obrotu $[\mathbf{Q}^R]_{(3 \times 3)}$, w postaci związku

$$[\mathbf{Q}^R]_{(3 \times 3)} [\bar{\mathbf{F}}]_{(3 \times 3)} [\mathbf{Q}^R]_{(3 \times 3)}^T = [\mathbf{F}]_{(3 \times 3)}. \quad (5.17)$$

Kinematyczne sterowanie procesem deformacji próbki odbywa się przy częściowym lub całkowitym (4.82) ustalenie wartości macierzy $[\bar{\mathbf{F}}]$ w układzie \bar{K}_S . Wówczas, macierz $[\mathbf{F}]$ można interpretować jako zadaną deformację obserwowaną względem lokalnego układu K_C związanego z początkową orientacją kryształu.

Składowe macierze obrotu można przedstawić w postaci $[\mathbf{Q}^R]_{(6 \times 6)}$ umożliwiającej obrót (5.18) składowych symetrycznych tensorów 2-go rzędu zapisanych w wektorowej reprezentacji Kelvina (5.14), por. (Cowin & Mehrabadi, 1995). Wówczas, składowe symetrycznego tensora naprężenia Kirchhoffa w notacji Kelvina (5.14) są transformowane (obracane) wg związku

$$[\mathbf{Q}^R]_{(6 \times 6)} [\bar{\boldsymbol{\tau}}]_{(6)} = [\boldsymbol{\tau}]_{(6)}. \quad (5.18)$$

Transformacja składowych tensora z układu K_C do układu \bar{K}_S wynika z równości $[\mathbf{Q}^R]^T [\mathbf{Q}^R] = \mathbf{1}$. Macierze obrotu $[\mathbf{Q}^R]$ w związku (5.17) oraz (5.18) umożliwiają wyznaczanie reprezentacji wielkości występujących w modelu kryształu zarówno względem układu K_C jak i układu \bar{K}_S . Macierz obrotu $[\mathbf{Q}^R]_{(9 \times 9)}$ (lub $[Q_{ij}^R]_{(9 \times 9)}$ w tablicach zawierających algorytmy) umożliwia transformację składowych niesymetrycznych tensorów 2-go rzędu zapisanych w postaci wektory (5.12) o dziewięciu składowych,

$$[\mathbf{Q}^R]_{(9 \times 9)} [\bar{\mathbf{F}}]_{(9)} = [\mathbf{F}]_{(9)}. \quad (5.19)$$

5.3.1 Skończone deformacje – algorytm lagrange’owski

Modelowany proces deformacji jest sterowany odkształceniowo z pełnymi więzami kinematycznymi (względem globalnego układu \bar{K}_S). Gradient deformacji $\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}}$, a poszukiwana część gradientu $\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$ (4.82). Proces obciążania jest prowadzony zgodnie z zadanym programem deformacji $\mathbf{F}(\lambda)$ kontrolowanym przez parametr obciążania λ , do końcowego stanu określonego przez wartość końcową λ_{end} .

Przyrostowa deformacja materiału

Parametr obciążania λ steruje urządzeniem obciążającym, więc ustalona dyskretyzacja ścieżki deformacji

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta\lambda, \quad (5.20)$$

umożliwia wyznaczenie w kolejnych krokach (t_n, t_{n+1}) wartości przyrostu gradientu deformacji

$$[\Delta\bar{\mathbf{F}}] = [\bar{\mathbf{F}}](\lambda_{n+1}) - [\bar{\mathbf{F}}](\lambda_n), \quad (5.21)$$

w układzie globalnym \bar{K}_S . Wartości całkowitego gradientu deformacji $[\bar{\mathbf{F}}](\lambda_{n+1})$ i $[\bar{\mathbf{F}}](\lambda_n)$ są znane. Wartość przyrostu parametru obciążania $\Delta\lambda$ w kolejnych krokach podstawowej pętli deformacji nie musi być stała. Postęp procesu deformacji odbywa się w podstawowej pętli (tab. 5.2), gdzie zadawany jest przyrost $\Delta\lambda$ na kroku (t_n, t_{n+1}) .

Tablica 5.2: Algorytm podstawowej pętli przyrostowej deformacji materiału.

Podstawowa pętla przyrostowej deformacji materiału⁴	
0.	Dane: $\bar{\mathbf{F}}(\lambda)$, $\Delta\lambda$ (możliwy zmienny przyrost), λ_{end} , $K, M = 1, \dots, n_s, n_s = 24$, $[\mathbf{C}^*]$, $[\mathcal{H}^{KL}(\gamma)]$, \mathbf{m}^K , \mathbf{n}^K , τ_0 , r , $[Q_{ij}^R]_{(9 \times 9)}$ Tol (Numeryczna dokładność obliczeń.)
1.	Inicjalizacja wartości początkowych dla kroku $n = 0$ i punktu $t_{n=0} = 0$: $\bar{\mathbf{S}}_{n=0} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_{n=0} = \bar{\mathbf{T}}_{n=0}^* = \mathbf{0}_{(3 \times 3)}$ $\mathbf{S}_{n=0} = \boldsymbol{\tau}_{n=0} = \mathbf{T}_{n=0}^* = \mathbf{0}_{(3 \times 3)}$ $\bar{\mathbf{F}}_{n=0} = \bar{\mathbf{F}}_{n=0}^P = \bar{\mathbf{F}}_{n=0}^* = \mathbf{1}_{(3 \times 3)}$ $\mathbf{F}_{n=0} = \mathbf{F}_{n=0}^P = \mathbf{F}_{n=0}^* = \mathbf{1}_{(3 \times 3)}$ $[\gamma^K]_{n=0} = [\Delta\gamma^K]_{n=0} = [0]_{(24)}$, $\mathcal{A}_{n=0} = \emptyset$ $[q^K]_{n=0} = [\tau_0]_{(24)}$, $[f^K]_{n=0} = [-\tau_0]_{(24)}$ $[\mathbf{m}^{*K}]_{n=0} = [\mathbf{m}^K]_{(24 \times 3)}$, $[\mathbf{n}^{*K}]_{n=0} = [\mathbf{n}^K]_{(24 \times 3)}$ $[\mathbf{s}^K] = [\text{MtoV9}(\mathbf{m}^{*K} \otimes \mathbf{n}^{*K})]_{(24 \times 9)}$
2.	Start głównej pętli deformacji $n = 0$ oraz kolejne kroki: JEŻELI $\lambda_{n+1} \leq \lambda_{\text{end}}$ TO OBLICZ : $\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}(\lambda_{n+1})$, gdzie $\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta\lambda$ $\mathbf{F}_{n+1} = \text{V9toM}([F_{ij}]_{n+1})$ $[F_{ij}]_{n+1} = [Q_{ij}^R] [\bar{F}_{ij}]_{n+1}$ $[\bar{F}_{ij}]_{n+1} = \text{MtoV9}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1})$ Dla danych wejściowych: $(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^*, \mathbf{F}_n^P, [\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, [q^K]_n, [g^{KL}]_n) \Rightarrow$ $\Rightarrow [\mathbf{ESP}] \Rightarrow ([\Delta\gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{n+1}$ Idź do punktu nr 3. ↓ PRZECIWNIE : przejdź do punktu nr 4. ↓
3.	Aktualizacja wartości globalnych: $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}^* = \text{V9toM}([\bar{F}_{ij}^*]_{n+1})$ $[\bar{F}_{ij}^*]_{n+1} = [Q_{ij}^R]^T [F_{ij}^*]_{n+1}$ $[F_{ij}^*]_{n+1} = \text{MtoV9}(\mathbf{F}_{n+1}^*)$ $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}^P = \text{V9toM}([\bar{F}_{ij}^P]_{n+1})$ $[\bar{F}_{ij}^P]_{n+1} = [Q_{ij}^R]^T [F_{ij}^P]_{n+1}$ $[F_{ij}^P]_{n+1} = \text{MtoV9}(\mathbf{F}_{n+1}^P)$ $\bar{\mathbf{T}}_{n+1}^* = \text{V9toM}([\bar{T}_{ij}^*]_{n+1})$ $[\bar{T}_{ij}^*]_{n+1} = [Q_{ij}^R]^T [T_{ij}^*]_{n+1}$ $[T_{ij}^*]_{n+1} = \text{MtoV9}(\mathbf{T}_{n+1}^*)$ $\bar{\boldsymbol{\tau}}_{n+1} = \text{V9toM}([\bar{\tau}_{ij}]_{n+1})$ $[\bar{\tau}_{ij}]_{n+1} = [Q_{ij}^R]^T [\tau_{ij}]_{n+1}$ $[\tau_{ij}]_{n+1} = \text{MtoV9}(\boldsymbol{\tau}_{n+1})$ $\bar{\mathbf{S}}_{n+1} = \text{V9toM}([\bar{S}_{ij}]_{n+1})$ $[\bar{S}_{ij}]_{n+1} = [Q_{ij}^R]^T [S_{ij}]_{n+1}$ $[S_{ij}]_{n+1} = \text{MtoV9}(\mathbf{S}_{n+1})$ Powiększ nr kroku $n = n + 1$, następnie idź do punktu nr 2. ↑
4.	Zatrzymanie głównej pętli deformacji.

Przed uruchomieniem pętli przyrostowej deformacji zadawane są wartości modułów sprężystości i plastyczności modelowanego kryształu oraz pozostałe wartości stałe w całym procesie deformacji (punkt **0** w tab. 5.2). Zadawane są wartości modułów sprężystości macierzy $[\mathbf{C}^*]_{(9 \times 9)}$, por. (2.24), oraz wartości modułów plastyczności określające macierz fizycznych modułów wzmocnienia $[\mathcal{H}^{KL}(\gamma)]_{(n_s \times n_s)}$, np. w postaci (2.58). W celu zastosowania minimalizacji energii przyrostowej należy wybrać metodę symetryzacji macierzy modułów interakcji $[g^{KL}]$, a przy zastosowaniu selektywnej symetryzacji (3.13) należy podać wartość parametru r ($0 \leq r \leq 1$).

W punkcie **1** algorytmu w tablicy 5.2, zadawane są początkowe wartości naprężenia i

⁴Symbole w nawiasach kwadratowych oraz symbole pisane pogrubioną czcionką bez nawiasów kwadratowych oznaczają macierze o różnych wymiarach, np. $[F_{ij}]_{(9)}$ oraz $\mathbf{F}_{(3 \times 3)}$.

odkształcenia względem globalnego \bar{K}_S i lokalnego K_C układu współrzędnych. Wartości te odpowiadają parametrowi obciążania $\lambda = 0$ w początkowym kroku $n = 0$. Pozostałe początkowe wartości to ścinanie $[\gamma_{n=0}^K]_{(n_S)}$, przyrosty ścinania $[\Delta\gamma_{n=0}^K]_{(n_S)}$, krytyczne naprężenie ścinające $[q_{n=0}^K]_{(n_S)}$ oraz funkcje plastyczności $[f_{n=0}^K = -\tau_0]_{(n_S)}$. Zmienne wzmocnienia $q^K = \tau_{cr}^K$ odpowiadają wartościom krytycznym naprężenia ścinającego.

Przyrost deformacji zadawany jest w pętli (punkt **2** algorytmu w tab. 5.2) przebiegającej po indeksach (n) zgodnie z przyjętym programem deformacji (5.21), do osiągnięcia końcowej wartości λ_{end} w kroku $n = n_{lk}$ (4 w tab. 5.2). Deformacja $[\mathbf{F}]_{n+1}$, obserwowana względem lokalnego układu K_C , jest obliczana przy pomocy ustalonej macierzy $[\mathbf{Q}^R]$ (5.15) i zastosowaniu transformacji (5.19) gradientu deformacji $[\bar{\mathbf{F}}]_{n+1}$ zadanego w układzie globalnym \bar{K}_S . Na etapie sprężysto-plastyczny (2 w tab. 5.2) obliczane są przyrosty ścinania oraz aktualizowany stan naprężenia na końcu kroku t_{n+1} .

Wyznaczony dla punktu t_{n+1} stan naprężenia i deformacji jest transformowany (5.19) do globalnego układu współrzędnych \bar{K}_S (3 w tab. 5.2), a następnie wykonany jest kolejny krok deformacji.

Etap Sprężysto-Plastyczny (ESP)

Etapem sprężysto-plastycznym (ESP) została nazywana procedura wyznaczania wartości poszukiwanych przyrostów przy zadanej długości przyrostowego kroku deformacji, od punktu wyznaczonego przez t_n do punktu t_{n+1} . Start etapu ESP (2 w tab. 5.2) odbywa się dla wartości obliczonych w poprzednim kroku i zadanej końcowej deformacji \mathbf{F}_{n+1} . Zgodnie ze schematem w tab. 5.3 etap ESP jest podzielony na dwa podetapy.

Tablica 5.3: Podział etapu sprężysto-plastycznego (ESP), pełne więzy kinematyczne.

Próbny etap sprężysty (EpS)	oraz	korygujący etap plastyczny (EkP)
dla $\Delta\lambda \neq 0$ i $\Delta\gamma^K = \Delta\gamma_{trial}^K = 0$		dla $(\mathbf{S}_{trial}, f_{trial}^K)$
oblicz $(\mathbf{S}_{trial}, f_{trial}^K)$		oblicz $\Delta\gamma^K \geq 0$ i $(\mathbf{S}_{n+1}, f_{n+1}^K \leq 0)$
oraz \mathcal{P}_{trial} jeśli $f_{trial}^K \geq 0$		oraz \mathcal{A}_{n+1} dla $\Delta\gamma^K > 0$

Pierwszy to próbny etap sprężysty (EpS), gdzie w jednej iteracji zostaje wyznaczany sprężysty stan próbny („trial”) i obliczone wartości naprężenia oraz funkcji plastyczności $(\mathbf{S}_{trial}, f_{trial}^K)$. Drugi to korygujący etap plastyczny (EkP) (tab. 5.6), wykonywany gdy próbny sprężysty stan naprężenia \mathbf{S}_{trial} przekroczy powierzchnie plastyczności f_{trial}^K . Po ustaleniu próbnego zbioru \mathcal{P}_{trial} (5.26) systemów przypuszczalnie aktywnych obliczane są przyrosty ścinania $\Delta\gamma^K$, a następnie zostaje aktualizowany stan naprężenia i wartości funkcji plastyczności $(\mathbf{S}_{n+1}, f_{n+1}^K)$.

Minimalizacja energii przyrostowej odbywa się przy wprowadzeniu etapu pomocniczego EpS, gdy parametru obciążania $\Delta\lambda \neq 0$. Wyznaczony pomocniczy stan próbny na początku kroku przyrostowej deformacji nie musi odpowiadać żadnemu rzeczywistemu stanowi naprężenia w materiale. Próbny etap sprężysty powstaje w wyniku deformacji materiału z chwilowym „zamrożeniem” plastycznego płynięcia (2.10), czyli przy założeniu $\Delta\gamma^K = 0$. Jeżeli próbny stan $(\mathbf{S}_{trial}, f_{trial}^K)$ spełnia warunek $f_{trial}^K < 0$ dla każdego systemu K (1 w tab. 5.4), to materiał na kroku (t_n, t_{n+1}) podlega rzeczywistej czysto sprężystej deformacji. Natomiast obliczone wartości próbne naprężenia i funkcji plastyczności odpowiadają wartościom rzeczywistym czysto sprężystym, na końcu kroku deformacji: $(\mathbf{S}_{n+1}, f_{n+1}^K) = (\mathbf{S}_{trial}, f_{trial}^K)$.

Tablica 5.4: Algorytm etapu sprężysto-plastycznego (ESP) dla skończonej długości przyrostu całkowitej deformacji.

Etap sprężysto-plastyczny	
0.	DANE: $[\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^*, \mathbf{F}_n^P, [q^K]_n, [g^{KL}]_n, [f^K]_n$
1.	Próbnny etap sprężysty (EpS): Dane wejściowe: $([\gamma^K]_n, [\Delta\gamma^K = 0]_{n+1}, \mathcal{A} = \emptyset, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n^P, [q^K]_n) \Rightarrow$ \Rightarrow Aktualizacja \Rightarrow Obliczone wartości próbne: $\Rightarrow (\mathcal{P}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{\text{trial}}$
2.	Sprawdzenie stanu naprężenia: JEŻELI $[f_{\text{trial}}^K \leq \text{Tol}]_{(24)}$ TO OBLICZ: Rzeczywisty stan sprężysty: $[\gamma^K]_{n+1} = [\gamma^K]_n, [\Delta\gamma^K]_{n+1} = [0]_{(24)}, \mathcal{A}_{n+1} = \emptyset$ $\mathbf{F}_{n+1}^* = \mathbf{F}_{\text{trial}}^*, \mathbf{F}_{n+1}^P = \mathbf{F}_{\text{trial}}^P$ $\mathbf{T}_{n+1}^* = \mathbf{T}_{\text{trial}}^*, \tau_{n+1} = \tau_{\text{trial}}, \mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_{\text{trial}}$ $[q^K]_{n+1} = [q^K]_{\text{trial}}, [f^K]_{n+1} = [f^K]_{\text{trial}}$ Przejdź do punktu nr 3. ↓ PRZECIWNIE, gdy $\mathcal{P}_{\text{trial}} \neq \emptyset$: Korygujący etap plastyczny (EkP): Dane wejściowe: $([\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^P, [q^K]_n, [g^{KL}]_n) \Rightarrow$ \Rightarrow EkP \Rightarrow $\Rightarrow ([\Delta\gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{n+1}$ Przejdź do punktu nr 3. ↓
3.	KONIEC: $([\Delta\gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{n+1}$

W przypadku gdy próbny stan naprężenia $\mathbf{S}_{\text{trial}}$ wyznaczony podczas etapu EpS wypadnie na lub przekroczy dowolną z powierzchni plastyczności f^K (**2** w tab. 5.4), to materiał na danym kroku może przejść w stan plastyczny. Obliczanie poszukiwanych wartości końcowych ($\mathbf{S}_{n+1}, f_{n+1}^K$) odbywa się w iteracyjnej pętli etapu EkP. W pętli obliczane są przyrosty korygujące (5.4), do chwili gdy wartości $(\Delta\gamma^K, f_{n+1}^K)$ spełnią warunki aktywacji systemów poślizgu (5.3).

W trakcie etapu EpS i etapu EkP wykonywana jest aktualizacja poszukiwanych wartości dla końca kroku t_{n+1} .

Aktualizacja przy obliczonych przyrostach ścinania

Algorytm aktualizacji (tab. 5.5) przebiega zgodnie z przyjętym modelem materiału, por. podrozdział (2.2), (2.4), (2.5), bez wykorzystania równań na przyrosty naprężenia i przyrosty wartości funkcji plastyczności (5.2).

Na etapie aktualizacji znane są przyrosty ścinania $[\Delta\gamma^K]_{m+1}$ (5.27). Natomiast obliczana jest wartość plastycznej oraz sprężystej części gradientu deformacji \mathbf{F}^P (2.10). Następnie obliczany jest stan naprężenia, diady systemów aktywnych, macierze wzmocnienia i interakcji systemów aktywnych oraz wartości funkcji plastyczności, por. tab 5.5.

Wzór na plastyczną część gradientu deformacji \mathbf{F}^P na końcu kroku obciążania wy-

Tablica 5.5: Algorytm aktualizacji dla nowych wartości przyrostów $[\Delta\gamma^K]_{m+1}$.

Aktualizacja	
0.	DANE: $[\Delta\gamma^K]_{m+1}, [\gamma^K]_{m=0}, \mathcal{A}_{m+1}, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_{m=0}^P, [q^K]_{m=0}$ STAŁE: $r, \tau_0, [\mathbb{C}^*], [\mathbf{s}^K], [\mathbf{m}^K], [\mathbf{n}^K]$ (W całym procesie deformacji.)
1.	Aktualizacja: Stan deformacji: $\mathbf{F}_{m+1}^P = \exp(\mathbf{V9toM}(\{\Delta\gamma_{m+1}^K\} [\mathbf{s}^K])) \mathbf{F}_{m=0}^P$ $\mathbf{F}_{m+1}^* = \mathbf{F}_{n+1} \mathbf{F}_{m+1}^{P^{-1}} \quad \mathbf{E}_{m+1}^* = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_{m+1}^* \mathbf{F}_{m+1}^{*T} - \mathbf{1})_{m+1}$ Stan naprężenia: $\mathbf{T}_{m+1}^* = \mathbf{V9toM}([T_{ij}^*]_{m+1}) \quad [T_{ij}^*]_{m+1} = [\mathbb{C}^*] [E_{ij}^*]_{m+1} \quad [E_{ij}^*]_{m+1} = \mathbf{MtoV9}(\mathbf{E}_{m+1}^*)$ $\mathbf{S}_{m+1} = \tau_{m+1} \mathbf{F}_{n+1}^{-T} \quad \tau_{m+1} = (\mathbf{F}_{m+1}^* \mathbf{T}_{m+1}^* \mathbf{F}_{m+1}^{*T})_{m+1} \quad \text{oraz} \quad [\tau_{ij}]_{m+1} = \mathbf{MtoV9}(\tau_{m+1})$ Tensor modułów sprężystości: $[\mathbb{L}^*]_{m+1} = [\mathbb{L}^*(\mathbf{F}_{m+1}^*, \tau_{m+1})]_{(9 \times 9)}$ Diady: $[\mathbf{m}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{F}_{m+1}^* \mathbf{m}^K]_{(24 \times 3)} \quad [\mathbf{n}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{F}_{m+1}^{*T} \mathbf{n}^K]_{(24 \times 3)}$ $[\mathbf{s}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{m}_{m+1}^{*K} \otimes \mathbf{n}_{m+1}^{*K}]_{(24 \times (3 \times 3))}$ $[\mathbf{w}^{*K}]_{m+1} = [\text{skew}(\mathbf{s}_{m+1}^{*K})]_{(24 \times (3 \times 3))} \quad [\mathbf{p}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{MtoV9}(\text{sym}(\mathbf{s}_{m+1}^{*K}))]_{(24 \times 9)}$ Macierz wzmocnienia i interakcji (+ metoda symetryzacji): $[\beta^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{MtoV9}(\mathbf{w}_{m+1}^{*K} \tau_{m+1} - \tau_{m+1} \mathbf{w}_{m+1}^{*K})]_{(24 \times 9)},$ $[\tau_{ss}^{KL}] = [\tau_{ij}]_{m+1} [\mathbf{MtoV9}(r \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - (1-r) \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K})]_{m+1}^T$ $[\text{Id}\mathcal{A}] = [\text{JEŻELI } K = L \in \mathcal{A}_{m+1} \text{ TO } 1 \text{ PRZECIWNIE } 0]_{(24 \times 24)}$ $[h^{*KL}]_{m+1} = [\mathcal{H}^{KL}(\gamma_{m=0}^K + \Delta\gamma_{m+1}^K)]_{(24 \times 24)} + [\text{Id}\mathcal{A}] [\tau_{ss}^{KL}] [\text{Id}\mathcal{A}]$ $[g^{KL}]_{m+1} = ([h^{*KL}]_{m+1} + [\mathbf{p}^{*K}] [\mathbb{L}^*] [\mathbf{p}^{*L}]^T + [\beta^{*K}] [\mathbf{p}^{*L}]^T)_{m+1}$ Funkcje plastyczności: $[\tau_{cr}^K]_{m+1} = [q_{m+1}^K] \quad \text{gdzie} \quad [q^K]_{m+1} = [q^K]_{m=0} + [h^{*KL}]_{m+1} [\Delta\gamma^K]_{m+1}$ $[f^K]_{m+1} = [\tau_{sch}^K]_{m+1} - [\tau_{cr}^K]_{m+1} \quad \text{gdzie} \quad [\tau_{sch}^K]_{m+1} = ([\mathbf{p}^{*K}] [\tau_{ij}])_{m+1}$
2.	KONIEC: $(\mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$

znaczono poprzez numeryczne scałkowanie równania prędkości plastycznej deformacji (2.10). Zagadnienie początkowe na plastyczną część gradientu deformacji można przedstawić w postaci tensorowego równania różniczkowego zwyczajnego

$$\dot{\mathbf{F}}^P(t) = \left(\sum_{K \in \mathcal{A}} \overset{\circ}{\gamma}^K \mathbf{s}^K \right) \mathbf{F}^P(t), \quad \text{z warunkiem początkowym } \mathbf{F}_n^P = \mathbf{F}^P(t_n), \quad (5.22)$$

na przyrostowym kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) . Występujące powyżej tensory są niesymetryczne, natomiast tensor \mathbf{s}^K ma stałe wartości. Zbiór systemów aktywnych \mathcal{A} oraz prędkości ścinania $\overset{\circ}{\gamma}^K$ nie muszą być stałe na kroku (t_n, t_{n+1}) .

Przybliżone rozwiązanie zagadnienia początkowego (5.22) jest obliczane w schemacie numerycznego całkowania (ang. the generalised exponential map midpoint rule) w postaci

$$\mathbf{F}_{n+1}^P = \exp\left(\sum_{K \in \mathcal{A}} \Delta\gamma^K \mathbf{s}^K \right)_{n+\theta} \mathbf{F}_n^P, \quad (5.23)$$

gdzie wartość parametru $0 \leq \theta \leq 1$ określa schemat całkowania. Jeżeli tensor \mathbf{F}_n oraz suma w nawiasie (5.22) posiada stałe wartości na kroku całkowania (t_n, t_{n+1}) to rozwiązanie \mathbf{F}_{n+1}^p jest ściśle (niezależnie od parametru θ).

Jądrem powyższego rozwiązania (5.23) jest funkcja eksponencjalna $\exp(\mathbf{T})$ argumentu tensorowego \mathbf{T} . Funkcja eksponencjalna dla dowolnego argumentu tensorowego \mathbf{T} może być wyznaczona w postaci rozwinięcia w szereg potęgowy

$$\exp(\mathbf{T}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \mathbf{T}^n. \quad (5.24)$$

Obliczanie wartości funkcji (5.24) w algorytmie aktualizacji (1. w tab. 5.5), dobywa się przy skróceniu nieskończonego ciągu wyrazów szeregu. Wartość funkcji można wyznaczać z pożądaną numeryczną dokładnością, uwzględniając w sumowaniu skończoną liczbę wyrazów. W praktycznych zastosowaniach wystarczy kilka pierwszych wyrazów. W szczególnym przypadku, gdy argumentem funkcji eksponencjalnej jest tensor antysymetryczny, np. $\boldsymbol{\omega}^T = \boldsymbol{\omega}^{-1}$, można zastosować klasyczną zamkniętą formułę wyznaczania wartości funkcji $\exp(\boldsymbol{\omega})$, por. punkt (5.3.2).

Aktualna wartość plastycznej części gradientu deformacji wyznaczona zgodnie z formułą (5.23) spełnia automatycznie warunek (2.7)₃ niezmienniczości objętości materiału (z narzuconą numeryczną dokładnością obliczeń). Natomiast w pracy (Anand & Kothari, 1996) obliczanie wartości plastycznej części gradientu deformacji odbywa się przy użyciu dwóch pierwszych członów rozwinięcia (5.24) oraz dodatkowym ograniczeniu nakładanym na objętość materiału: $\det(\mathbf{F}^p)_{n+1} = 1$ na końcu kroku deformacji.

Próbnny Etap Sprężysty (EpS)

Stan próbny jest obliczany przy założeniu $\Delta\gamma^L = 0$, więc wartości próbne naprężenia i funkcji plastyczności wyznaczone z równań (5.2) dla skończonych przyrostów można przedstawić w postaci

$$\mathbf{S}_{\text{trial}} = \mathbf{S}_n + \mathbb{A}_{n=\text{trial}} \cdot \Delta\mathbf{F}, \quad (5.25)$$

$$f_{\text{trial}}^K = f_n^K + \mathbb{A}_{n=\text{trial}}^K \cdot \Delta\mathbf{F}.$$

Etap EkP jest obliczany przy użyciu algorytmu aktualizacji (tab. 5.5) i uruchamiany dla wartości $(\Delta\gamma_n^K, \gamma_n^K, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^p, \mathbf{F}_n^*, q_n^K, f_n^K)$ znanych z poprzedniego kroku oraz gradientu \mathbf{F}_{n+1} na końcu kroku w chwili t_{n+1} . Wyznaczanie próbnych wartości sprężystych odbywa się w algorytmie aktualizacji (1 w tab. 5.5) przy założeniu braku ścinania $\Delta\gamma_{m+1}^L = 0$. Jeżeli wszystkie funkcje plastyczności spełniają warunek $f_{\text{trial}}^K < 0$ to materiał jest w stanie sprężystym, a obliczone na etapie aktualizacji (2 w tab. 5.5) próbne wartości (1 w tab. 5.4) są rzeczywistymi na końcu kroku t_{n+1} .

W przeciwnym przypadku, gdy warunek $f_{\text{trial}}^K < 0$ nie jest spełniony przez wszystkie funkcje plastyczności, to zbiór przypuszczalnie aktywnych systemów

$$\mathcal{P}_{\text{trial}} = [K : f_{\text{trial}}^K \geq 0], \quad (5.26)$$

nie jest pusty. W celu identyfikacji rzeczywistego zbioru systemów aktywnych \mathcal{A} na danym przyroście deformacji należy uruchomić etap EkP, gdzie iteracyjnie wyznaczany jest rzeczywisty sprężysto-plastyczny stan naprężenia.

Korygujący Etap Plastyczny (EkP)

Korygujący etap plastyczny (EkP) (tab. 5.6) obejmuje procedurę obliczania niezerowych przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$ z zastosowaniem minimalizacji przyrostu energii Δw (punkt 3a algorytmu w tab. 5.6).

Aktualny przyrost ścinania jest obliczany jako

$$\Delta\gamma_{m+1}^K = \Delta\gamma_m^K + \Delta^2\gamma^K, \quad (5.27)$$

przy ograniczeniu $\Delta\gamma_{m+1}^K \geq 0$. Aktualny zbiór systemów aktywnych, na końcu iteracji, jest obliczany w postaci

$$\mathcal{A}_{m+1} = [K : \Delta\gamma_{m+1}^K > 0]. \quad (5.28)$$

Kluczowym miejscem w algorytmie etapu EkP (w iteracyjnej pętli korygującej) jest procedura minimalizacji przyrostu energii Δw (tab. 5.7), gdzie wyznaczane są korygujące przyrosty 2-go rzędu (5.4):

$$\Delta^2\gamma^K \longleftarrow \min_{\substack{\Delta\gamma_m^K + x^K \geq 0 \\ K \in \mathcal{A}_m}} (\Delta w), \quad \text{gdzie } \Delta w = \frac{1}{2} \sum_{KL \in \mathcal{A}_m} x^K g_m^{KL} x^L - \sum_{K \in \mathcal{A}_m} f_m^K x^K. \quad (5.29)$$

Wartości macierzy modułów interakcji g_m^{KL} (dla zadanej metody symetryzacji np. (3.13)) oraz wartości funkcji plastyczności f_m^K są przyjmowane z końca poprzedniej iteracji (m). Poszukiwanie minimum energii przyrostowej (5.29) odbywa się przy zastosowaniu metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a (podrozdział 5.2).

Inicjalizacja wartości początkowych dla pierwszej iteracji $m = 0$ pętli etapu EkP polega na przypisaniu wartości próbnych („trial”) wyznaczonych w próbnym etapie sprężystym (EpS) oraz wartości z poprzedniego (n)-tego kroku deformacji (1 w tab. 5.6).

Minimalizacja energii przyrostowej (tab. 5.7) w kolejnych iteracjach jest wykonywana względem korygujących przyrostów ścinania $\Delta^2\gamma^K$ na systemach należących do zbioru \mathcal{A}_m wyznaczonego w poprzedniej iteracji (m). Zbiór systemów $\mathcal{A}_{m=0}$ uwzględnianych przy minimalizacji w iteracji początkowej ($m = 0$), zostaje przyjęty jako zbiór przypuszczalnie aktywnych systemów $\mathcal{P}_{\text{trial}}$ (5.26). Zbiór $\mathcal{P}_{\text{trial}}$ jest wyznaczany w etapie EpS, zgodnie z podejściem proponowanym w pracy (Miehe, 1996b). Zbiór systemów uwzględnianych przy minimalizacji zostaje poszerzony o systemy, które spełniają warunek $[f_{m+1}^{K \notin \mathcal{A}_{m+1}} \geq 0]$. Poszerzenie zbioru odbywa się w celu spełnienia warunków aktywacji na końcu kroku (5.3).

Aktualizacja (tab. 5.5) wartości części sprężystej i plastycznej deformacji, naprężenia oraz funkcji plastyczności odbywa się w kolejnych iteracjach etapu EkP, dla obliczonych wartości $\Delta\gamma_{m+1}^K$.

Po wyznaczeniu przyrostów ścinania i zaktualizowaniu stanu materiału, sprawdzane są dyskretne warunki aktywacji (5.3). Nierówność $\Delta\gamma_{m+1}^K \geq 0$ dla wszystkich systemów K jest spełniona automatycznie po minimalizacji energii przyrostowej. W przypadku, gdy warunki aktywacji są spełnione to stan naprężenia leży na powierzchni plastyczności (w narożu plastycznym) lub wewnątrz powierzchni. Wówczas, następuje koniec korygującego etapu plastycznego (EkP), a obliczone wartości z iteracji ($m + 1$) (4 w tab. 5.6) są poszukiwanymi wartościami na końcu kroku deformacji t_{n+1} (3 w tab. 5.4). W przeciwnym przypadku, gdy warunki aktywacji (5.3) nie są spełnione, należy wykonać kolejną iterację w etapie EkP (3a w tab. 5.6).

Tablica 5.6: Algorytm korygującego etapu plastycznego (EkP).

Korygujący Etap Plastyczny	
0.	START: $[\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^P, [q^K]_n, [g^{KL}]_n$
1.	<p>Inicjalizacja wartości początkowych dla iteracji $m = 0$ oraz $\mathbf{F}_{\text{FIN}m} = \mathbf{F}_{n+1}$</p> $\mathbf{F}_{m=0}^P = \mathbf{F}_n^P \quad [\gamma^K]_{m=0} = [\gamma^K]_n, \quad [\Delta\gamma^K]_{m=0} = [\Delta^2\gamma^K] = [0], \quad \mathcal{A}_{m=0} = \emptyset$ $[q^K]_{m=0} = [q^K]_n, \quad [g^{KL}]_{m=0} = [g^{KL}]_n$ <p>Dla danych: $\mathbf{F}_{\text{FIN}m}$ oraz $([\gamma^K], [\Delta\gamma^K], \mathcal{A}, \mathbf{F}^P, [q^K])_{m=0} \Rightarrow$</p> $\Rightarrow \boxed{\text{Aktualizacja}} \Rightarrow [f^K]_{\text{trial}} = [f^K]_{m=0} \quad \text{oraz} \quad \mathcal{A}_{m=0} = \mathcal{A}_n$
2.	<p>JEŻELI $\mathcal{A}_{m=0} \neq \emptyset$ ($\wedge \mathcal{A}_{m=0} \leq 5$) TO OBLICZ:</p> <p>Rozwiązanie układu równań dla $m = 0$ i kolejnych $m + 1$ iteracji:</p> <p>2a. JEŻELI $[f_m^{K \in \mathcal{A}_{m=0}} > \text{Tol}]_{(24)} \wedge m \leq lw$ TO OBLICZ:</p> $[\Delta^2\gamma^K] = \boxed{\text{Rozwiązanie Układu } (\mathcal{A}_{m=0}, [g^{KL}]_m, [f^K]_m)}$ <p>Aktualizacja wielkości dla iteracji $m + 1$: $[\Delta\gamma^K]_{m+1} = [\Delta\gamma^K]_m + [\Delta^2\gamma^K]$</p> <p>Dla danych: $([\gamma^K]_{m=0}, [\Delta\gamma^K]_{m+1}, \mathcal{A}_{m=0}, \mathbf{F}_{\text{FIN}m}, \mathbf{F}_m^P, [q^K]_{m=0}) \Rightarrow$</p> $\Rightarrow \boxed{\text{Aktualizacja}} \Rightarrow (\mathbf{F}^P, \mathbf{F}^*, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$ <p>Powiększ nr iteracji $m = m + 1$, następnie powrót do punktu nr 2a. ↑</p> <p>PRZECIWNIE: Idź do punktu nr 3. ↓</p> <p>PRZECIWNIE: Idź do punktu nr 3. ↓</p>
3.	<p>Sprawdzenie poprawności rozwiązania układu równań.</p> <p>JEŻELI $[f_m^{K \in \mathcal{A}_m} \leq \text{Tol}] \wedge [f_m^{K \notin \mathcal{A}_m} < \text{Tol}] \wedge [\Delta\gamma^K \geq 0]_{(24)} \wedge \mathcal{A}_m = \mathcal{A}_n$</p> <p>TO: Rozwiązanie układu równań jest poprawne. ($\mathcal{A}_m = \mathcal{A}_n$) Idź do punktu 4. ↓</p> <p>PRZECIWNIE: Iteracyjne wyznaczanie $[\Delta\gamma^K]$ przez minimalizację energii:</p> $[\gamma^K]_{m=0} = [\gamma^K]_n, \quad [\Delta^2\gamma^K] = [\Delta\gamma^K]_{m=0} = [0]_{(24)}$ $\mathcal{A}_m = [K : (f_{m=0}^K > \text{Tol} \vee K \in \mathcal{A}_{m=0})]$ $[q^K]_{m=0} = [q^K]_n, \quad [g^{KL}]_{m=0} = [g^{KL}]_n, \quad [f^K]_{m=0} = [f^K]_{\text{trial}}$ <p>3a. JEŻELI $[f_m^{K \in \mathcal{A}_m} > \text{Tol}] \vee [f_m^{K \notin \mathcal{A}_m} \geq \text{Tol}] \wedge m < lw$ TO OBLICZ:</p> $[\Delta^2\gamma^K] = \boxed{\text{MINIMALIZACJA } ([\Delta\gamma^K]_m, \mathcal{A}_m, [g^{KL}]_m, [f^K]_m)}$ <p>Aktualizacja dla iteracji $m + 1$:</p> $[\Delta\gamma^K]_{m+1} = [\Delta\gamma^K]_m + [\Delta^2\gamma^K] \quad \text{oraz} \quad [\gamma^K]_{m+1} = [\gamma^K]_{m=0} + [\Delta\gamma^K]_{m+1}$ $\mathcal{A}_{m+1} = [K : \Delta\gamma_{m+1}^K > 0]$ <p>Dla danych: $([\gamma^K]_{m=0}, [\Delta\gamma^K]_{m+1}, \mathcal{A}_{m+1}, \mathbf{F}_{\text{FIN}m}, \mathbf{F}_m^P, [q^K]_{m=0},) \Rightarrow$</p> $\Rightarrow \boxed{\text{Aktualizacja}} \Rightarrow (\mathbf{F}^P, \mathbf{F}^*, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$ <p>(JEŚLI $[f_{m+1}^{K \in \mathcal{A}_{m+1}} \leq \text{Tol}] \wedge [f_{m+1}^{K \notin \mathcal{A}_{m+1}} \geq \text{Tol}]$ TO:</p> <p>uruchom procedurę powiększania zbioru \mathcal{A}_{m+1})</p> <p>Powiększ nr iteracji $m = m + 1$, następnie powrót do punktu nr 3a. ↑</p> <p>PRZECIWNIE: Idź do punktu 4. ↓</p> <p>PRZECIWNIE: Idź do punktu 4. ↓</p>
4.	KONIEC: $([\Delta\gamma^K], \mathcal{A}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \tau, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$

Tablica 5.7: Algorytm minimalizacji przyrostu energii.

MINIMALIZACJA	
0.	START: $[\Delta\gamma^K]_m, \mathcal{A}_m, [g^{KL}]_m, [f^K]_m$
1.	Obliczanie przyrostów ścinania 2-go rzędu $[\Delta^2\gamma^K]$: Macierz alokacji systemów aktywnych: $\mathbb{A}_m = [\mathbb{A}(\mathcal{A}_m)] = [\delta^{KL} : K \in \mathcal{A}_m, L = 1, \dots, 24]_{(\mathcal{A}_m \times 24)}$ $[G^R] = [\mathbb{A}_m [g^{KL}]_m \mathbb{A}_m^T]$, $[f^R] = \mathbb{A}_m [f^K]_m$, $[\Delta\gamma^R] = \mathbb{A}_m [\Delta\gamma^K]_m$ $[\Delta^2\gamma^R] \leftarrow \min_{\mathbf{x}, [\Delta\gamma^R] + \mathbf{x} \geq \mathbf{0}} \left(\frac{1}{2} \mathbf{x} [G^R] \mathbf{x} - [f^R] \mathbf{x} \right)$, $[\Delta^2\gamma^K] = \mathbb{A}_m^T [\Delta^2\gamma^R]$
2.	KONIEC: $[\Delta^2\gamma^K]$

Tablica 5.8: Algorytm rozwiązywania wprost zlinearyzowanego układu równań na przyrosty ścinania.

Rozwiązywanie układu równań	
0.	START: $\mathcal{A}_{m=0}, [g^{KL}]_m, [f^K]_m$
1.	Obliczanie przyrostów ścinania 2-go rzędu $[\Delta^2\gamma^K]$: $\mathbb{A}_0 = [\mathbb{A}(\mathcal{A}_{m=0})] = [\delta^{KL} : K \in \mathcal{A}_0, L = 1, \dots, 24]_{(\mathcal{A}_0 \times 24)}$ $[G^R] = [\mathbb{A}_0 [g^{KL}]_m \mathbb{A}_0^T]$, $[f^R] = \mathbb{A}_0 [f^K]_m$ $[\Delta^2\gamma^R] \leftarrow [G^R][\Delta^2\gamma^R] = [f^R]$ (LinearSolve) $[\Delta^2\gamma^K] = \mathbb{A}_0^T [\Delta^2\gamma^R]$
2.	KONIEC: $[\Delta^2\gamma^K]$

W celu przyspieszenia obliczeń dopuszczana jest możliwość obliczania korygujących przyrostów ścinania $\Delta^2\gamma^K$ poprzez rozwiązywanie wprost zlinearyzowanego układu równań zagadnienia konstytutywnego (punkt **2a** algorytmu w tab. 5.6). Rozwiązanie pochodzące z układu równań (algorytm w tab. 5.8) jest przyjmowane jako prawidłowe w przypadku, gdy zbiór \mathcal{A} aktywnych systemów poślizgu jest stały na całym kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) . Rozwiązywanie układu równań odbywa się przy użyciu funkcji `LinearSolve`⁵ wbudowanej w program Mathematica.

5.3.2 Alternatywny algorytm eulerowski

Algorytm nazywany eulerowskim został wprowadzony w celu porównania oraz sprawdzenia poprawności rozwiązań otrzymywanych przy użyciu algorytmu lagrange'owskiego (punkt 5.3.1). Takie porównanie wydaje się być celowe zarówno pod względem sprawdzenia prawidłowego wyznaczenia wartości przyrostów ścinania, zbioru systemów aktywnych jak i zmian obrotów sieci kryształu. Zmiany obrotów sieci w modelowaniu

⁵`LinearSolve` to funkcja programu Mathematica (www.wolfram.com) rozwiązująca liniowe układy równań.

dużych deformacji kryształów metali nie mogą zostać pominięte. Ich precyzyjne obliczanie jest kluczowe w modelowaniu rzeczywistych procesów deformacji monokryształów metali, por. punkt 6.1.4.

Analiza wyników uzyskanych przy użyciu algorytmu lagrange'owskiego i eulerowskiego oraz algorytmu dla małych odkształceń (w punkcie 5.3.3 poniżej), potwierdza numeryczną poprawność ich działania. Porównania wyników dotyczące m.in. wyboru systemów aktywnych, przebiegu naprężeń oraz obrotów sieci kryształu, nie zostały zamieszczone w niniejszej pracy.

Algorytm eulerowski został skonstruowany poprzez zastosowanie numerycznego schematu całkowania związków konstytutywny modelu kryształu, przy wymogu dyskretnego spełniania zasady obiektywności. Przyrostowo obiektywne algorytmy (ang. „the incrementally objective algorithm”) wykluczają produkcję błędnego naprężenia podczas ruchu sztywnego ciała, por. (Simo & Hughes, 1998).

Poniżej zamieszczono ogólną postać związków określających kinematykę całkowitej deformacji, wykorzystaną następnie w konstrukcji obiektywnego algorytmu eulerowskiego.

Deformacja całkowita względem konfiguracji pośredniej

Zastosowany algorytm eulerowski wykorzystuje uogólnioną regułę całkowania w konfiguracji pośredniej $t_{n+\alpha}$. Algorytm jest obiektywny dla parametru $\alpha \in [0, 1]$, który określa konfigurację pośrednią $t_{n+\alpha}$. Nie ma tu ograniczeń na wartości dopuszczalnych przyrostowych obrotów.

Gradient deformacji $\mathbf{F}_{n+\alpha}$ w konfiguracji pośredniej ($n + \alpha$) jest kombinacją liniową gradientu \mathbf{F}_n w konfiguracji (n) i gradientu \mathbf{F}_{n+1} w konfiguracji ($n + 1$)

$$\mathbf{F}_{n+\alpha} = \alpha \mathbf{F}_{n+1} + (1 - \alpha) \mathbf{F}_n. \quad (5.30)$$

Przy użyciu gradientu deformacji $\mathbf{F}_{n+\alpha}$ (5.30) można określić gradienty względne umożliwiające przechodzenie między trzema konfiguracjami (n), ($n + \alpha$) i ($n + 1$),

$$\mathbf{f}_{n+\alpha} = \mathbf{F}_{n+\alpha}^{-1} \mathbf{F}_n, \quad \mathbf{f}_{n+1} = \mathbf{F}_{n+1}^{-1} \mathbf{F}_n \quad \text{oraz} \quad \tilde{\mathbf{f}}_{n+\alpha} = \mathbf{F}_{n+1}^{-1} \mathbf{F}_{n+\alpha}. \quad (5.31)$$

Względny gradient przyrostu deformacji $\Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha}$, por. (2.9), jest wyznaczany w postaci

$$\Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha} = (\mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{F}_n) \mathbf{F}_{n+\alpha}^{-1}. \quad (5.32)$$

Obiektywna przyrostowa postać tensora eulerowskiej prędkości odkształcenia $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}$ w konfiguracji pośredniej ($n + \alpha$)

$$\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha} = \frac{1}{2} (\Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha} + \Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha}^T + (1 - 2\alpha) \Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha}^T \Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha}), \quad (5.33)$$

jest wyznaczana jako $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha} = \mathbf{f}_{n+\alpha}^T \mathbf{E}_{n+1} \mathbf{f}_{n+\alpha}^{-1}$, gdzie $\mathbf{E}_{n+1} = \frac{1}{2} (\mathbf{f}_{n+1}^T \mathbf{f}_{n+1} - \mathbf{1})$ to odkształcenie Greena. Wielkość $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}$ (5.33) spełnia warunek przyrostowej obiektywności dla $\alpha \in [0, 1]$. Należy podkreślić, że przyrost tensora prędkości odkształcenia $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}$, przyjęty jako symetryczna część względnego gradientu przyrostu deformacji, czyli wielkość $\text{sym}(\Delta t \mathbf{l}_{n+\alpha})$, jest przyrostowo obiektywny tylko, gdy parametr $\alpha = 1/2$.

Przyrostowa postać tensora chwilowej prędkości obrotowej $\Delta t \boldsymbol{\omega}_{n+\alpha}$ jest wyznaczana jako antysymetryczna część gradientu przyrostu deformacji $\Delta t \boldsymbol{l}_{n+\alpha}$ (5.32), czyli

$$\Delta t \boldsymbol{\omega}_{n+\alpha} = \frac{1}{2} (\Delta t \boldsymbol{l}_{n+\alpha} - \Delta t \boldsymbol{l}_{n+\alpha}^{\text{T}}). \quad (5.34)$$

Obroty sieci kryształu

Obliczanie aktualnej orientacji sieci kryształu (2.8) w algorytmie eulerowskim, wymaga znajomości tensora $\boldsymbol{\omega}^*$ chwilowej prędkości obrotowej sieci i będzie tu wyznaczana przy istotnym założeniu upraszczającym, por. (5.43).

Z twierdzenia o rozkładzie biegunowym tensora drugiego rzędu, część gradientu deformacji określającą deformację sieci \mathbf{F}^* można przedstawić w postaci iloczynu

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{R}^* \mathbf{U}^*, \quad (5.35)$$

ortogonalnego tensora \mathbf{R}^* obrotu oraz dodatnio określonego symetrycznego prawego tensora \mathbf{U}^* rozciągnięcia sieci kryształu. Przy użyciu rozkładu biegunowego (5.35) aktualne wektory sieci (2.8) można przedstawić w postaci

$$\mathbf{m}^{*K} = \mathbf{R}^* \mathbf{U}^* \mathbf{m}^K, \quad \mathbf{n}^{*K} = \mathbf{R}^* \mathbf{U}^{*\text{T}} \mathbf{n}^K. \quad (5.36)$$

Wektory \mathbf{m}^{*K} i \mathbf{n}^{*K} podlegają obrotom na skutek tensora \mathbf{R}^* oraz rozciągnięciom w wyniku \mathbf{U}^* .

Wykorzystując multiplikatywny rozkład (2.7) gradientu deformacji oraz rozkład biegunowy części sprężystej (5.35), gradient prędkości \boldsymbol{l} (2.9) w konfiguracji aktualnej \mathcal{C} , można przedstawić w postaci sumy trzech członów

$$\boldsymbol{l} = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\text{T}} + \dot{\mathbf{R}}^* \dot{\mathbf{U}}^* \mathbf{U}^{*\text{T}} \mathbf{R}^{*\text{T}} + \mathbf{F}^* \dot{\mathbf{F}}^{\text{P}} \mathbf{F}^{\text{P}\text{T}} \mathbf{F}^{*\text{T}}. \quad (5.37)$$

Powyżej można zauważyć, że pierwszy człon to antysymetryczny tensor $\boldsymbol{\Omega}^*$ spinu sieci

$$\boldsymbol{\Omega}^* = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*\text{T}}. \quad (5.38)$$

Ostatni człon w (5.37) to plastyczna część gradientu prędkości deformacji $\boldsymbol{l}^{\text{P}}$, która zgodnie z prawem plastycznego płynięcia (2.11) zależy od aktualnej orientacji wektorów sieci. Gradient prędkości (5.37) można przedstawić z wykorzystaniem tensorów $\boldsymbol{\Omega}^*$ i $\boldsymbol{l}^{\text{P}}$ w postaci

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{\Omega}^* + \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{U}}^* \mathbf{U}^{*\text{T}} \mathbf{R}^{*\text{T}} + \boldsymbol{l}^{\text{P}}. \quad (5.39)$$

Tensor prędkości odkształcenia jako symetryczna część gradientu prędkości jest w postaci sumy dwóch niezerowych członów

$$\mathbf{d} = \text{sym}(\boldsymbol{l}) = \mathbf{0} + \underbrace{\mathbf{R}^* \text{sym}(\dot{\mathbf{U}}^* \mathbf{U}^{*\text{T}}) \mathbf{R}^{*\text{T}}}_{\mathbf{d}^*} + \mathbf{d}^{\text{P}}, \quad (5.40)$$

gdzie \mathbf{d}^{P} (2.14) jest symetryczną częścią tensora $\boldsymbol{l}^{\text{P}}$ (2.11). Antysymetryczna część gradientu prędkości $\boldsymbol{\omega}$, czyli tensor chwilowej prędkości obrotowej, jest w postaci sumy

$$\boldsymbol{\omega} = \text{skew}(\boldsymbol{l}) = \underbrace{\boldsymbol{\Omega}^* + \mathbf{R}^* \text{skew}(\dot{\mathbf{U}}^* \mathbf{U}^{*\text{T}}) \mathbf{R}^{*\text{T}}}_{\boldsymbol{\omega}^*} + \boldsymbol{\omega}^{\text{P}}, \quad (5.41)$$

gdzie ω^P jest wyznaczony jako antysymetryczna część tensora \mathbf{l}^P i dany wzorem (2.14). Tensor chwilowej prędkości obrotowej sprężystej części gradientu deformacji ω^* jest obliczany w postaci różnicy

$$\omega^* = \omega - \omega^P = \Omega^* + \mathbf{R}^* \frac{1}{2} (\dot{\mathbf{U}}^* \mathbf{U}^{*-1} - (\dot{\mathbf{U}}^* \mathbf{U}^{*-1})^T) \mathbf{R}^{*T}. \quad (5.42)$$

Tensor ω^* chwilowej prędkości obrotowej zależy od sztywnego obrotu poprzez \mathbf{R}^* i od sprężystych rozciągnięć sieci kryształu \mathbf{U}^* .

Wyznaczanie obrotów sieci kryształu w obiektywnym algorytmie eulerowskim będzie przy upraszczającym założeniu $\mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}$, czyli pominięciu wpływu rozciągnięć na wektory sieci. Wpływ tensora \mathbf{d}^* na deformację wektorów sieci zostanie zaniedbany, więc w obliczaniu obrotów sieci obowiązuje przybliżenie $\mathbf{d}^* \approx \mathbf{0}$. Aktualna orientacja wektorów sieci (5.36) jest wyznaczana z wykorzystaniem przybliżenia w postaci

$$\mathbf{m}^{*K} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{m}^K, \quad \mathbf{n}^{*K} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{n}^K, \quad (\text{przy } \mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}). \quad (5.43)$$

Przy użyciu związków określających prędkości wektorów (2.15), gdzie tensor $\mathbf{l}^* = \mathbf{d}^* + \omega^*$, oraz przy pominięciu wpływu tensora \mathbf{d}^* na deformację (rozciągnięcia) wektorów \mathbf{m}^{*K} i \mathbf{n}^{*K} , można wyznaczyć prędkość zmiany wektorów w sposób przybliżony

$$\dot{\mathbf{m}}^{*K} \approx \omega^* \mathbf{m}^{*K}, \quad \dot{\mathbf{n}}^{*K} \approx \omega^* \mathbf{n}^{*K}, \quad (\mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}), \quad (5.44)$$

gdzie antysymetryczny tensor ω^* jest przybliżany tensorem spinu sieci Ω^* w postaci

$$\omega^* \approx \Omega^* = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T}, \quad (\mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}). \quad (5.45)$$

Wprowadzenie założenia upraszczającego $\mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}$ eliminuje rozciągnięcia sieci, a tensor ω^* chwilowej prędkości obrotowej sieci jest traktowany jako spin sieci. Zmianę obrotów sieci określa równanie w postaci

$$\dot{\mathbf{Q}}^* = \omega^* \mathbf{Q}^*, \quad (5.46)$$

gdzie wprowadzono symbol \mathbf{Q}^* oznaczający ortogonalny tensor obrotu sieci, który umożliwia wyznaczanie aktualnych obrotów sieci (5.43) jako

$$\mathbf{m}^{*K} = \mathbf{Q}^* \mathbf{m}^K, \quad \mathbf{n}^{*K} = \mathbf{Q}^* \mathbf{n}^K. \quad (5.47)$$

Należy tutaj zauważyć, że powyżej wprowadzony aktualny obrót sieci kryształu \mathbf{Q}^* jest różny od obrotu \mathbf{R}^* , który jest wyznaczany z rozkładu biegunowego (5.35) tensora \mathbf{F}^* .

Numeryczne całkowanie równania na zmianę obrotu sieci

W obiektywnym algorytmie eulerowskim, por. tab. (5.10), aktualna orientacja sieci kryształu $(\mathbf{m}^{*K}, \mathbf{n}^{*K})_{n+1}$ jest obliczana według wzorów (5.47). Wielkość obrotu sieci \mathbf{Q}_{n+1}^* jest wyznaczana po numerycznym scałkowaniu równania (5.46) na długości kroku (t_n, t_{n+1}) , w postaci

$$\mathbf{Q}_{n+1}^* = \exp(\Delta t \omega_{n+\alpha}^*) \mathbf{Q}_n^*. \quad (5.48)$$

Antysymetryczny tensor $\Delta t \boldsymbol{\omega}_{n+\alpha}^*$ (przy powyżej wprowadzonym założeniu upraszczającym $\mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}$) to różnica tensora chwilowej prędkości obrotowej (5.34) i części plastycznej (2.14)

$$\Delta t \boldsymbol{\omega}_{n+\alpha}^* = \Delta t \boldsymbol{\omega}_{n+\alpha} - \sum_{K=1}^{n_S} \Delta \gamma^K \mathbf{w}_{n+\alpha}^{*K}. \quad (5.49)$$

Obliczanie wartości funkcji eksponencjalnej $\exp(\boldsymbol{\omega})$ (5.48) antysymetrycznego tensora $\boldsymbol{\omega}$ odbywa się przy użyciu zamkniętej formuły w postaci tzw. wzoru Rodriguesa

$$\exp(\boldsymbol{\omega}) = \mathbf{1} + \frac{\sin(|\boldsymbol{\omega}|)}{|\boldsymbol{\omega}|} \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2} \left(\frac{\sin(|\boldsymbol{\omega}|/2)}{|\boldsymbol{\omega}|/2} \right)^2 \boldsymbol{\omega}^2, \quad (5.50)$$

gdzie antysymetryczny tensor $\boldsymbol{\omega}$ ma reprezentację w postaci macierzy

$$\boldsymbol{\omega} = \begin{pmatrix} 0 & -\omega_3 & \omega_2 \\ \omega_3 & 0 & -\omega_1 \\ -\omega_2 & \omega_1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.51)$$

natomiast norma $|\boldsymbol{\omega}|$ dotyczy wektora o składowych $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \omega_2, \omega_3)$ ((Simo & Hughes, 1998)).

Inne, niestosowane tu podejścia do wyznaczania wartości funkcji $\exp(\boldsymbol{\omega})$, wykorzystują parametry Eulera (z punktami osobliwym dla $|\boldsymbol{\omega}| = n\pi$, gdzie n to dowolna liczba nieparzysta) lub osiowo kątową reprezentację obrotów czyli tzn. kwaterniony (ang. quaternion parameters), por. (Simo & Hughes, 1998).

Obroty sieci mogą być wyznaczane bez wykorzystania funkcji eksponencjalnej, np. z równania wyznaczonego przez numeryczne całkowanie związku (5.46). Całkowanie jest wg schematu uogólnionego z parametrem θ określającym punkt pośredni, por. (Hughes & Winget, 1980).

Inne podejście polega na wyznaczaniu aktualnej orientacji sieci poprzez obliczanie wartości przyrostów kątów Eulera, (Clement, 1982), (Kowalczyk, 2001). W drugiej z powyższych prac zaproponowano metodę pokonywania osobliwości, która może wystąpić przy $\Phi = 0$. Przyrosty kątów Eulera, które określają orientację wektorów sieci, są wyznaczane z wykorzystaniem składowych tensora spinu sieci.

W pracy (Kok et al., 2001) przedstawiono cztery schematy (dwa jawne i dwa niejawnie) numerycznego całkowania równania określającego zmiany orientacji sieci, przy uwzględnieniu zależności argumentu funkcji eksponencjalnej od poszukiwanego obrotu (5.42). Do konstruowania metod obliczania obrotów wykorzystano własności komutatywne (niesymetrycznych) tensorów, natomiast do obliczania wartości funkcji eksponencjalnej zastosowano parametryzację bazującą na pojęciu kwaternionu.

Numeryczne całkowanie związków konstytutywnych

Przyrostowo obiektywny związek umożliwiający aktualizację wartości naprężenia Kirchhoffa $\boldsymbol{\tau}_{n+1}$ na końcu kroku deformacji

$$\boldsymbol{\tau}_{n+1} - \mathbf{f}_{n+1}^* \boldsymbol{\tau}_n \mathbf{f}_{n+1}^{*\top} = \mathbf{c}_{n+1} \cdot \Delta t \mathbf{d}_{n+1}^* \quad (5.52)$$

jest wyznaczany przy użyciu związku konstytutywnego (2.24) w konfiguracji odciążonej \mathcal{C}^P oraz wzorów transformacyjnych (2.26). Przyrostowy związek dla pochodnej Liego

naprężenia Kirchhoffa w konfiguracji pośredniej, por. (2.27), jest w postaci

$$\Delta t \mathcal{L}_v^* \tau_{n+\alpha} = \mathbf{c}_{n+\alpha} \cdot \Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^*, \quad \text{gdzie} \quad \Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^* = \mathbf{f}_{n+\alpha}^{*-T} \mathbf{E}_n^* \mathbf{f}_{n+\alpha}^{*-1}. \quad (5.53)$$

Sprężysta część tensora eulerowskiej prędkości odkształcenia $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^*$ zależy od względnego sprężystego tensora gradientu deformacji $\mathbf{f}_{n+\alpha}^* = \mathbf{F}_{n+\alpha}^* \mathbf{F}_n^{*-1}$. Tensor modułów sprężystości \mathbf{c}_{n+1} w konfiguracji t_{n+1} jest w postaci

$$\mathbf{c}_{n+1} = \tilde{\mathbf{f}}_{n+\alpha}^* \star \mathbf{c}_{n+\alpha}, \quad \text{gdzie} \quad \mathbf{c}_{n+\alpha} = \mathbf{F}_{n+\alpha}^* \star \mathbf{C}^*, \quad (5.54)$$

Symbol \star oznacza pełne nasunięcie czterech tensorów drugiego rzędu na tensor czwartego rzędu, por. (2.28). Względne sprężyste gradienty deformacji są w postaci

$$\mathbf{f}_{n+1}^* = \mathbf{F}_{n+1}^* \mathbf{F}_n^{*-1} \quad \text{oraz} \quad \tilde{\mathbf{f}}_{n+\alpha}^* = \mathbf{F}_{n+1}^* \mathbf{F}_{n+\alpha}^{*-1}. \quad (5.55)$$

W tym miejscu należy zauważyć brak równości między tensorem $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^*$ w obiektywnym algorytmie eulerowskim wyznaczonym wg wzoru (5.53), a różnicą tensorów przyrostu całkowitego $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}$ wyznaczanego jako (5.33) i plastycznego $\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^P$ wg wzoru (2.14) w konfiguracji $n + \alpha$:

$$\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^* \neq (\Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha} - \Delta t \mathbf{d}_{n+\alpha}^P) \quad (5.56)$$

Po wprowadzeniu założenia upraszczającego deformację wektorów sieci jedynie do obrotów (5.47) i z wykorzystaniem rozkładu biegunowego (5.35) tensora \mathbf{F}^* , aktualizacja wartości naprężenia Kirchhoffa (5.57) jest w postaci

$$\tau_{n+1} - \mathbf{q}_{n+1}^* \tau_n \mathbf{q}_{n+1}^{*T} = \mathbf{c}_{n+1} \cdot \Delta t \mathbf{d}_{n+1}^*, \quad (5.57)$$

gdzie przy założeniu $\mathbf{U}^* \approx \mathbf{1}$ tensor względnej deformacji $\mathbf{f}^* \approx \mathbf{q}^*$. W związku (5.57) symbol $\mathbf{q}_{n+1}^* = \mathbf{Q}_{n+1}^* \mathbf{Q}_n^{*T}$ oznacza tensor względnego obrotu sieci.

Wybrane bloki algorytmu eulerowskiego

Obliczeniowy algorytm eulerowski wykorzystuje minimalizację energii przyrostowej w sposób analogiczny do algorytmu lagrange'owskiego. Blokowa struktura algorytmu eulerowskiego jest identyczna ze strukturą algorytmu lagrange'owskiego, por. tab. 5.1, więc nie będzie tu szczegółowo omawiana. W tablicach 5.9, 5.10, 5.11 i 5.12 przedstawiono wybrane bloki algorytmu eulerowskiego.

Tablica 5.9: Podstawowa pętla przyrostowej deformacji algorytmu eulerowskiego.

Podstawowa pętla przyrostowej deformacji materiału	
0.	Inicjalizacja wielkości stałych w procesie deformacji.
1.	Inicjalizacja wartości początkowych dla kroku $n = 0$ gdy $t_{n=0} = 0$ $\bar{\tau}_{n=0} = \Delta t \bar{\mathbf{d}}_{n=0}^P = \Delta t \bar{\mathbf{d}}_{n=0}^* = \mathbf{0} \quad (\text{Wielkości w układzie globalnych})$ $\tau_{n=0} = \Delta t \mathbf{d}_{n=0}^* = \Delta t \mathbf{d}_{n=0}^P = \mathbf{0} \quad (\text{Wielkości w układzie lokalnym})$ $\Delta t \omega_{n=0}^* = \Delta t \omega_{n=0}^P = \mathbf{0},$ $[q^K]_{n=0} = [\tau_0]_{(24)} \quad \text{oraz} \quad [f^K]_{n=0} = [-\tau_0]_{(24)}$ $[\gamma^K]_{n=0} = [\Delta \gamma^K]_{n=0} = [0]_{(24)} \quad \text{oraz} \quad \mathcal{A}_{n=0} = \emptyset$ $[\mathbf{m}^{*K}]_{n=0} = [\mathbf{m}^K]_{(24 \times 6)} \quad \text{oraz} \quad [\mathbf{n}^{*K}]_{n=0} = [\mathbf{n}^K]_{(24 \times 6)}$
2.	Start głównej pętli lub kolejne kroki obciążania $n + 1$: JEŻELI $\lambda_{n+1} \leq \lambda_{\text{end}}$ TO OBLICZ: $\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta \lambda$ oraz $\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}(\lambda_{n+1})$ Transformacja (obrót) do lokalnego układu współrzędnych: $\mathbf{F}_{n+1} \leftarrow [F_{ij}]_{n+1} = [Q_{ij}^R]_{(9 \times 9)} [\bar{F}_{ij}]_{n+1}$ Dla danych wejściowych: $([\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{Q}_n^*, \tau_n, [q^K]_n, [g^{KL}]_n)$ oblicz: ESP $([\Delta \gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \Delta t \mathbf{d}^*, \Delta t \mathbf{d}^P, \Delta t \omega^*, \Delta t \omega^P, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [f^K], [g^{KL}])_{n+1}$ Idź do punktu nr 3. ↓ PRZECIWNIE: przejdź do punktu nr 4. ↓
3.	Aktualizacja wartości globalnych: $\Delta t \bar{\mathbf{d}}_{n+1}^* \leftarrow [\Delta t \bar{d}_{ij}^*]_{n+1} = [Q_{ij}^R]_{(6 \times 6)}^T [\Delta t \bar{d}_{ij}^*]_{n+1}$ $\Delta t \bar{\mathbf{d}}_{n+1}^P \leftarrow [\Delta t \bar{d}_{ij}^P]_{n+1} = [Q_{ij}^R]_{(6 \times 6)}^T [\Delta t \bar{d}_{ij}^P]_{n+1}$ $\bar{\tau}_{n+1} \leftarrow [\bar{\tau}_{ij}]_{n+1} = [Q_{ij}^R]_{(6 \times 6)}^T [\tau_{ij}]_{n+1}$ $\bar{\mathbf{S}}_{n+1} \leftarrow [\bar{S}_{ij}]_{n+1} = [Q_{ij}^R]_{(9 \times 9)}^T [S_{ij}]_{n+1}$ Powiększ nr kroku $n = n + 1$, następnie idź do punktu nr 2. ↑
4.	Zatrzymanie głównej pętli deformacji.

Tablica 5.10: Algorytm aktualizacji dla nowo obliczonych wartości przyrostów ścinania $[\Delta\gamma^K]_{m+1}$.

Aktualizacja (Obiektywny algorytm eulerowski)	
0.	DANE: $[\Delta\gamma^K]_{m+1}, [\gamma^K]_{m=0}, \mathcal{A}_{m+1}, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \boldsymbol{\tau}_{m=0}, \mathbf{Q}_{m=0}^*, [q^K]_{m=0}$ STAŁE: α, r
1.	<p>Aktualizacja: Deformacja:</p> $\mathbf{l}_{n+\alpha} = (\mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{F}_n) \mathbf{F}_{n+\alpha}^{-1}, \quad \text{gdzie} \quad \mathbf{F}_{n+\alpha} = \alpha \mathbf{F}_{n+1} + (1 - \alpha) \mathbf{F}_n$ $\mathbf{d}_{n+\alpha} = \frac{1}{2} (\mathbf{l}_{n+\alpha} + \mathbf{l}_{n+\alpha}^T + (1 - 2\alpha) \mathbf{l}_{n+\alpha}^T \mathbf{l}_{n+\alpha})$ $\boldsymbol{\omega}_{n+\alpha} = \frac{1}{2} (\mathbf{l}_{n+\alpha} - \mathbf{l}_{n+\alpha}^T)$ $\mathbf{d}_{m+1}^* = \mathbf{d}_{n+1} - \sum_{K=1}^{n_S} \Delta\gamma_{m+1}^K \mathbf{P}_m^{*K}$ $\boldsymbol{\omega}_{m+1}^* = \boldsymbol{\omega}_{n+\alpha} - \sum_{K=1}^{n_S} \Delta\gamma_{m+1}^K \mathbf{w}_m^{*K}$ $\mathbf{Q}_{m+1}^* = \exp(\boldsymbol{\omega}_{n+\alpha}^*) \mathbf{Q}_{m=0}^* \quad \text{oraz} \quad \mathbf{q}_{m+1}^* = \mathbf{Q}_{m+1}^* \mathbf{Q}_{m=0}^{*T}$ <p>Tensor modułów sprężystości: $\mathbf{c}_{m+1} = \mathbf{Q}_{m+1}^* \star \mathbb{C}^*$</p> <p>Napężenie: $\boldsymbol{\tau}_{m+1} = \mathbf{q}_{m+1}^* \boldsymbol{\tau}_n \mathbf{q}_{m+1}^{*T} + \mathbf{c}_{m+1} \cdot \mathbf{d}_{m+1}^*$</p> <p>Diady:</p> $[\mathbf{m}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{Q}_{m+1}^* \mathbf{m}^K]_{(24 \times 3)} \quad [\mathbf{n}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{Q}_{m+1}^* \mathbf{n}^K]_{(24 \times 3)}$ $[\mathbf{s}^{*K}]_{m+1} = [\mathbf{m}_{m+1}^{*K} \otimes \mathbf{n}_{m+1}^{*K}]_{(24 \times (3 \times 3))}$ $[\mathbf{w}^{*K}]_{m+1} = [\text{skew}(\mathbf{s}_{m+1}^{*K})]_{(24 \times (3 \times 3))} \quad [\mathbf{p}^{*K}]_{m+1} = [\text{MtoV9}(\text{sym}(\mathbf{s}_{m+1}^{*K}))]_{(24 \times 9)}$ <p>Macierz wzmocnienia i interakcji (+ metoda symetryzacji):</p> $[\boldsymbol{\beta}^{*K}]_{m+1} = [\text{MtoV9}(\mathbf{w}_{m+1}^{*K} \boldsymbol{\tau}_{m+1} - \boldsymbol{\tau}_{m+1} \mathbf{w}_{m+1}^{*K})]_{(24 \times 9)},$ $[\boldsymbol{\tau}^{\text{ss}^{KL}}] = [\boldsymbol{\tau}_{ij}]_{m+1} [\text{MtoV9}(r \mathbf{s}^{*K} \mathbf{s}^{*L} - (1 - r) \mathbf{s}^{*L} \mathbf{s}^{*K})]_{m+1}^T$ $[\text{Id}\mathcal{A}] = [\text{JEŻELI } K = L \in \mathcal{A}_{m+1} \text{ TO } 1 \text{ PRZECIWNIE } 0]_{(24 \times 24)}$ $[h^{*KL}]_{m+1} = [\mathcal{H}^{KL}(\boldsymbol{\gamma}_{m=0}^K + \Delta\boldsymbol{\gamma}_{m+1}^K)]_{(24 \times 24)} + [\text{Id}\mathcal{A}] [\boldsymbol{\tau}^{\text{ss}^{KL}}] [\text{Id}\mathcal{A}]$ $[g^{KL}]_{m+1} = ([h^{*KL}]_{m+1} + [\mathbf{p}^{*K}] [\mathbb{L}^*] [\mathbf{p}^{*L}]^T + [\boldsymbol{\beta}^{*K}] [\mathbf{p}^{*L}]^T)_{m+1}$ <p>Funkcje plastyczności:</p> $[\boldsymbol{\tau}_{\text{cr}}^K]_{m+1} = [q_{m+1}^K], \quad \text{gdzie} \quad [q^K]_{m+1} = [q^K]_{m=0} + [h^{*KL}]_{m+1} [\Delta\boldsymbol{\gamma}^K]_{m+1}$ $[f^K]_{m+1} = [\boldsymbol{\tau}_{\text{sch}}^K]_{m+1} - [\boldsymbol{\tau}_{\text{cr}}^K]_{m+1}, \quad \text{gdzie} \quad [\boldsymbol{\tau}_{\text{sch}}^K]_{m+1} = ([\mathbf{p}^{*K}] [\boldsymbol{\tau}_{ij}])_{m+1}$
2.	KONIEC: $(\Delta t \mathbf{d}^*, \Delta t \mathbf{d}^P, \Delta t \boldsymbol{\omega}^*, \Delta t \boldsymbol{\omega}^P, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$

Tablica 5.11: Algorytm etapu sprężysto-plastycznego (ESP).

Etap sprężysto-plastyczny (Obiektywny algorytm eulerowski)	
0.	DANE: $([\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \tau_n, \mathbf{Q}_n^*, [q^K]_n, [g^{KL}]_n)$
1.	<p>Próbnny Etap Sprężysty: Dane wejściowe: $([\gamma^K]_n, [\Delta\gamma^K = 0]_{n+1}, \mathcal{A} = \emptyset, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \tau_n, \mathbf{Q}_n^*, [q^K]_n)$</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <div style="text-align: center; border: 1px solid black; padding: 2px; width: fit-content; margin: 0 auto;">Aktualizacja</div> <p style="text-align: center;">↓</p> $(\Delta t d^*, \Delta t d^P, \Delta t \omega^*, \Delta t \omega^P, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{\text{trial}}$ Przejdź do punktu nr 2. ↓
2.	<p>Sprawdzenie stanu naprężenia: JEŻELI $[f_{\text{trial}}^K \leq \text{Tol}]_{(24)}$ TO OBLICZ: Rzeczywisty stan sprężysty:</p> $\begin{aligned} [\gamma^K]_{n+1} &= [\gamma^K]_n, & [\Delta\gamma^K]_{n+1} &= [0]_{(24)}, & \mathcal{A}_{n+1} &= \emptyset \\ \Delta t \mathbf{d}_{n+1}^* &= \Delta t \mathbf{d}_{\text{trial}}^*, & \Delta t \mathbf{d}_{n+1}^P &= \Delta t \mathbf{d}_{\text{trial}}^P \\ \Delta t \omega_{n+1}^* &= \Delta t \omega_{\text{trial}}^*, & \Delta t \omega_{n+1}^P &= \Delta t \omega_{\text{trial}}^P \\ \tau_{n+1} &= \tau_{\text{trial}}, & \mathbf{Q}_{n+1}^* &= \mathbf{Q}_{\text{trial}}^* \\ [q^K]_{n+1} &= [q^K]_{\text{trial}}, \\ [g^{KL}]_{n+1} &= [g^{KL}]_{\text{trial}}, & [f^K]_{n+1} &= [f^K]_{\text{trial}} \end{aligned}$ Przejdź do punktu nr 3. ↓ <p>PRZECIWNIE: Etap plastyczny: Dane wejściowe: $([\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \tau_n, \mathbf{Q}_n^*, [q^K]_n, [g^{KL}]_n)$</p> <p style="text-align: center;">↓</p> <div style="text-align: center; border: 1px solid black; padding: 2px; width: fit-content; margin: 0 auto;">EkP</div> <p style="text-align: center;">↓</p> $([\Delta\gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \Delta t \mathbf{d}^*, \Delta t \mathbf{d}^P, \Delta t \omega^*, \Delta t \omega^P, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{n+1}$ Przejdź do punktu nr 3. ↓
3.	<p>KONIEC: $([\Delta\gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \Delta t \mathbf{d}^*, \Delta t \mathbf{d}^P, \Delta t \omega^*, \Delta t \omega^P, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{n+1}$</p>

Tablica 5.12: Algorytm korygującego etapu plastycznego (EkP).

Korygujący Etap Plastyczny (Obiektyny algorytm eulerowski)	
0.	START: $([\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, \mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{Q}_n^*, [q^K]_n, [g^{KL}]_n)$
1.	<p>Inicjalizacja wartości początkowych dla iteracji $m = 0$:</p> $\mathbf{F}_{\text{FIN}m} = \mathbf{F}_{n+1}, \quad \mathbf{Q}_{m=0}^* = \mathbf{Q}_n^*$ $[\gamma^K]_{m=0} = [\gamma^K]_n, \quad [\Delta\gamma^K]_{m=0} = [\Delta^2\gamma^K] = [0], \quad \mathcal{A}_{m=0} = \emptyset$ $[q^K]_{m=0} = [q^K]_n, \quad [g^{KL}]_{m=0} = [g^{KL}]_n$ <p>Dla danych: $\mathbf{F}_{\text{FIN}m}$ i \mathbf{F}_n oraz $([\gamma^K], [\Delta\gamma^K], \mathcal{A}, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K])_{m=0} \Rightarrow$ \Rightarrow Aktualizacja $\Rightarrow [f^K] = [f^K]_{\text{trial}} = [f^K]_{m=0}$ $\mathcal{A}_{m=0} = \mathcal{A}_n$</p>
2.	<p>JEŻELI $\mathcal{A}_{m=0} \neq \emptyset$ ($\wedge \mathcal{A}_{m=0} \leq 5$) TO OBLICZ:</p> <p>Rozwiązanie układu równań dla $m = 0$ i kolejnych $m + 1$ iteracji:</p> <p>2a. JEŻELI $[f_m^{K \in \mathcal{A}_{m=0}} > \text{Tol}]_{(24)} \wedge m \leq lw$ TO OBLICZ:</p> $[\Delta^2\gamma^K] = \text{Rozwiązanie Układu } (\mathcal{A}_{m=0}, [g^{KL}]_m, [f^K]_m)$ <p>Aktualizacja dla iteracji $m + 1$, gdy $[\Delta\gamma^K]_{m+1} = [\Delta\gamma^K]_m + [\Delta^2\gamma^K]$ Dla danych: $([\Delta\gamma^K]_{m+1}, \mathbf{F}_{\text{FIN}m}, \mathbf{F}_n)$ i $(\mathcal{A}, [\gamma^K], \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K])_{m=0} \Rightarrow$ \Rightarrow Aktualizacja \Rightarrow $(\Delta t^*, \Delta t^{\text{P}}, \Delta t\omega^*, \Delta t\omega^{\text{P}}, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$</p> <p>Powiększ nr iteracji $m = m + 1$, następnie powrót do punktu nr 2a. ↑ PRZECIWNIE: Idź do punktu nr 3. ↓ PRZECIWNIE: Idź do punktu nr 3. ↓</p>
3.	<p>Sprawdzenie poprawności rozwiązania układu równań.</p> <p>JEŻELI $[f_m^{K \in \mathcal{A}_m} \leq \text{Tol}] \wedge [f_m^{K \notin \mathcal{A}_m} < \text{Tol}] \wedge [\Delta\gamma^K \geq 0]_{(24)} \wedge \mathcal{A}_m = \mathcal{A}_n$ TO: Rozwiązanie układu równań jest poprawne. ($\mathcal{A}_m = \mathcal{A}_n$) Idź do punktu 4. ↓ PRZECIWNIE: Iteracyjne wyznaczanie $[\Delta\gamma^K]$ przez minimalizację energii:</p> $[\gamma^K]_{m=0} = [\gamma^K]_n, \quad [\Delta^2\gamma^K] = [\Delta\gamma^K]_{m=0} = [0]_{(24)}$ $\mathcal{A}_m = [K : (f_{m=0}^K > \text{Tol} \vee K \in \mathcal{A}_{m=0})]$ $[q^K]_{m=0} = [q^K]_n, \quad [g^{KL}]_{m=0} = [g^{KL}]_n, \quad [f^K]_{m=0} = [f^K]_{\text{trial}}$ <p>3a. JEŻELI $[f_m^{K \in \mathcal{A}_m} > \text{Tol}] \vee [f_m^{K \notin \mathcal{A}_m} \geq \text{Tol}] \wedge m < lw$ TO OBLICZ:</p> $[\Delta^2\gamma^K] = \text{MINIMALIZACJA } ([\Delta\gamma^K]_m, \mathcal{A}_m, [g^{KL}]_m, [f^K]_m)$ <p>Aktualizacja dla iteracji $m + 1$:</p> $[\Delta\gamma^K]_{m+1} = [\Delta\gamma^K]_m + [\Delta^2\gamma^K] \quad \text{oraz} \quad [\gamma^K]_{m+1} = [\gamma^K]_{m=0} + [\Delta\gamma^K]_{m+1}$ $\mathcal{A}_{m+1} = [K : \Delta\gamma_{m+1}^K > 0]$ <p>Dla danych: $([\Delta\gamma^K]_{m+1}, \mathcal{A}_{m+1}, \mathbf{F}_{\text{FIN}m}, \mathbf{F}_n)$ i $([\gamma^K], \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K])_{m=0} \Rightarrow$ \Rightarrow Aktualizacja \Rightarrow $(\Delta t^*, \Delta t^{\text{P}}, \Delta t\omega^*, \Delta t\omega^{\text{P}}, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{m+1}$</p> <p>(JEŚLI $[f_{m+1}^{K \in \mathcal{A}_{m+1}} \leq \text{Tol}] \wedge [f_{m+1}^{K \notin \mathcal{A}_{m+1}} \geq \text{Tol}]$ TO: uruchom procedurę powiększania zbioru \mathcal{A}_{m+1})</p> <p>Powiększ nr iteracji $m = m + 1$, następnie powrót do punktu nr 3a. ↑ PRZECIWNIE: Idź do punktu 4. ↓ PRZECIWNIE: Idź do punktu 4. ↓</p>
4.	KONIEC: $([\Delta\gamma^K], \mathcal{A}, \Delta t^*, \Delta t^{\text{P}}, \Delta t\omega^*, \Delta t\omega^{\text{P}}, \tau, \mathbf{Q}^*, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_m$

5.3.3 Małe odkształcenia – bez uwzględnienia obrotów sieci

Niniejszy punkt dotyczy algorytmu modelowania procesów przyrostowej sprężysto-plastycznej deformacji w ramach teorii geometrycznie liniowej, por. rozdział 2.9, bez uwzględnienia obrotów sieci.

Nieznany zbiór systemów aktywnych \mathcal{A} oraz przyrosty ścinania $\Delta\gamma^K$ są wyznaczone, jak w przypadku dużych deformacji, z wykorzystaniem minimalizacji energii przyrostowej, por. (4.81). Znaczne uproszczenia struktury algorytmu wynikają z ograniczeń teorii małych odkształceń bez obrotów sieci. Ponieważ struktura algorytmu obliczeniowego jest analogiczny do przypadku dużych deformacji (tab. 5.1), nie ma więc potrzeby przytaczania w tym miejscu dokładnej postaci algorytmu małych odkształceń.

W niniejszym punkcie symbole pisane pogrubioną lub podwójną czcionką (ε , $\bar{\varepsilon}^e$, $\bar{\varepsilon}^p$, σ , \mathbb{C}) oznaczają wektory (5.14) lub macierze reprezentacji tensorów w zapisie Kelvina. Macierz obrotu \mathbf{Q}^R jest tu dla uproszczenia bez nawiasów prostokątnych, por. (5.15).

Pętla przyrostowej deformacji

Modelowane procesy małych sprężysto-plastycznych odkształceń bez uwzględnienia obrotów sieci są sterowane odkształceniowo, przy pełnej kontroli kinematycznej jak w podrozdziale 5.3. Parametr obciążania λ określa przebieg całkowitego odkształcenia $\bar{\varepsilon}(\lambda)$ względem globalnego układu \bar{K}_S . W każdym przyrostowym kroku (t_n, t_{n+1}) procesu deformacji o ustalonej długości $\Delta\lambda$ obliczany jest przyrost całkowitego globalnego odkształcenia $\Delta\bar{\varepsilon}$.

W podstawowej pętli przyrostowej deformacji materiału program odkształcania jest określony jako

$$\boxed{\bar{\varepsilon}_{n+1} = \bar{\varepsilon}_n + \Delta\bar{\varepsilon}}, \quad (5.58)$$

gdzie przyrost $\Delta\bar{\varepsilon}$ może być modyfikowany w kolejnych krokach głównej pętli.

Na początku kroku t_n znany jest wektor ścinania $\gamma_n = [\gamma_n^K]_{(n_S)}$, zbiór systemów aktywnych \mathcal{A}_n , część plastyczna $\bar{\varepsilon}_n^p$ (oraz sprężysta $\bar{\varepsilon}_n^e$) odkształcenia, krytyczne wartości naprężeń ścinających $\mathbf{q}_n = [\tau_{cr n}^K]_{(n_S)}$ oraz funkcje plastyczności $\mathbf{f}_n = [f_n^K]_{(n_S)}$. Na końcu przyrostu deformacji, dla punktu t_{n+1} , poszukiwane są wartości naprężenia $\bar{\sigma}_{n+1}$ i odkształcenia plastycznego $\bar{\varepsilon}_{n+1}^p$ (oraz sprężystego $\bar{\varepsilon}_{n+1}^e$) w globalnym układzie \bar{K}_S .

Przejście z lokalnego układu współrzędnych K_C do globalnego \bar{K}_S (analogiczne do związku 5.18) jest w postaci

$$\boxed{\bar{\sigma}_{n+1} = \mathbf{Q}^R \sigma_{n+1}, \quad \bar{\varepsilon}_{n+1}^p = \mathbf{Q}^R \varepsilon_{n+1}^p}, \quad (5.59)$$

gdzie macierz obrotu $\mathbf{Q}^R = \mathbf{Q}_{(6 \times 6)}^R$ (5.15) określa transformację między układami współrzędnych \bar{K}_S i K_C , por. (Cowin & Mehrabadi, 1995).

Symetria miar (σ , ε), w odróżnieniu do niesymetrycznych miar (\mathbf{S} , \mathbf{F}) w dużych deformacjach (punkt 5.3.1), umożliwia stosowanie reprezentacji w postaci sześcieelementowej macierzy jednokolumnowej (5.14) (oraz macierzy (6×6) dla tensora modułów sprężystości) przy użyciu notacji Kelvina, por. (Cowin & Mehrabadi, 1995).

Korygujący etap plastyczny (EkP)

Etap EkP jest wykonywana, jeżeli naprężenie próbne σ_{trial} przekroczy powierzchnie plastyczności $[f^K]_{(n_S)}$, przy zadanej numerycznej dokładności obliczeń (Tol). Korygujący etap plastyczny (EkP) zawiera iteracyjną procedurę aktualizacji całkowitych przyrostów ścinania $\Delta\gamma_{m+1}$ na kroku deformacji (t_n, t_{n+1})

$$\Delta\gamma_{m+1} = \Delta\gamma_m + \Delta^2\gamma, \quad (5.60)$$

por. (5.4). Korygujące przyrosty ścinania 2-go rzędu $\Delta^2\gamma = [\Delta^2\gamma^K]$ są obliczane w kolejnych iteracjach (m) przy zastosowaniu minimalizacji energii przyrostowej

$$\Delta^2\gamma^R \leftarrow \min_{\Delta^2\mathbf{x}, \Delta\gamma_m + \Delta^2\mathbf{x} \geq 0} \left(\frac{1}{2} \Delta^2\mathbf{x} \mathbf{G}_m^R \Delta^2\mathbf{x} - \mathbf{f}_m^R \Delta^2\mathbf{x} \right), \quad (5.61)$$

dla zbioru $\mathcal{A}_m \neq \emptyset$. Przyrost energii został wyznaczony przez wprowadzenie $\Delta\gamma_{m+1}$ (5.60) do wzoru na przyrostu energii Δw (4.80) sformułowanego dla miar symetrycznych (σ, ε) , por. podrozdział (2.9). Obliczone z (5.61) przyrosty 2-go rzędu to $\Delta^2\gamma_{(\mathcal{A}_m)}^R$, gdzie górny indeks R oznacza zredukowanie wektora $\Delta^2\gamma$ do elementów odpowiadających zbiorowi \mathcal{A}_m . Zbiór systemów aktywnych \mathcal{A}_m jest przyjmowany z poprzedniej iteracji (m) etapu EkP i umożliwi skonstruowanie macierzy $\mathbb{A}_m = \mathbb{A}(\mathcal{A}_m)$, przeznaczonej do selekcji systemów (przypuszczalnie) aktywnych z (m)-tej iteracji EkP. Przy pomocy macierzy \mathbb{A}_m , pełna macierz $\mathbf{G}_m = [g_m^{KL}]_{(n_S \times n_S)}$ modułów interakcji (2.84) jest zredukowana do $\mathbf{G}_m^R = \mathbb{A}_m (\mathbf{K}(\gamma_m) + \mu \mathbf{C} \mu^T) \mathbb{A}_m^T$ (pełna oznacza tu dla wszystkich systemów). Analogicznie cała lista funkcji plastyczności \mathbf{f}_m jest zredukowana do listy $\mathbf{f}_m^R = \mathbb{A}_m \mathbf{f}_m$. Symbol $\mathbf{K} = [\mathcal{K}^{KL}]_{(n_S \times n_S)}$ oznacza pełną macierz fizycznych modułów wzmocnienia, natomiast $\mu = [\mu^K]_{(n_S \times 6)}$ macierz kierunków plastycznego płynięcia (2.81).

Tablica 5.13: Algorytm aktualizacji odkształcenia, naprężenia oraz funkcji plastyczności dla nowo obliczonych wartości korekcyjnych przyrostów ścinania $\Delta^2\gamma$ (dla $m+1$).

Aktualizacja (Małe odkształcenia)	
0.	DANE: $(\Delta\gamma_m, \Delta^2\gamma^R, \gamma_{m=0}, \mathbb{A}_m, \varepsilon_{m=0}^P, \sigma_{m=0}, \mathbf{q}_{m=0})$
1.	Aktualizacja: $\Delta\gamma_{m+1} = \Delta\gamma_m + \mathbb{A}_m^T \Delta^2\gamma^R$ $\gamma_{m+1} = \gamma_0 + \Delta\gamma_{m+1}, \quad \mathcal{A}_{m+1} = [K : \Delta\gamma_{m+1}^K > 0]$ $\sigma_{m+1} = \sigma_0 - \mathbf{C} \mu^T \Delta\gamma_{m+1} \quad \varepsilon_{m+1}^P = \varepsilon_0^P + \mu^T \Delta\gamma_{m+1}$ $\mathbf{q}_{m+1} = \mathbf{q}_0 + \mathbf{K}(\gamma_{m+1}) \Delta\gamma_{m+1} \quad \mathbf{f}_{m+1} = \mu \sigma_{m+1} - (\mathbf{q}_{m+1} + \tau_0)$
2.	KOŃCOWE: $(\Delta\gamma, \gamma, \mathcal{A}, \varepsilon^P, \sigma, \mathbf{q}, \mathbf{f})_{m+1}$

Aktualizacja

Po obliczeniu korygujących przyrostów 2-go rzędu $\Delta^2\gamma$ (z minimalizacji (5.61) lub przez rozwiązanie zlinearyzowanego układu równań) w procedurze aktualizacji (punkt nr 1 tab. 5.13) wyznaczane są całkowite przyrosty $\Delta\gamma_{m+1}$ (5.60) i aktualny zbiór \mathcal{A}_{m+1} (4.23). Następnie obliczane są nowe wartości ścinania, odkształcenia, naprężenia oraz

funkcji plastyczności. Procedura aktualizacji jest wywoływana zawsze po minimalizacji energii przyrostowej (5.61) wewnątrz etapu EkP.

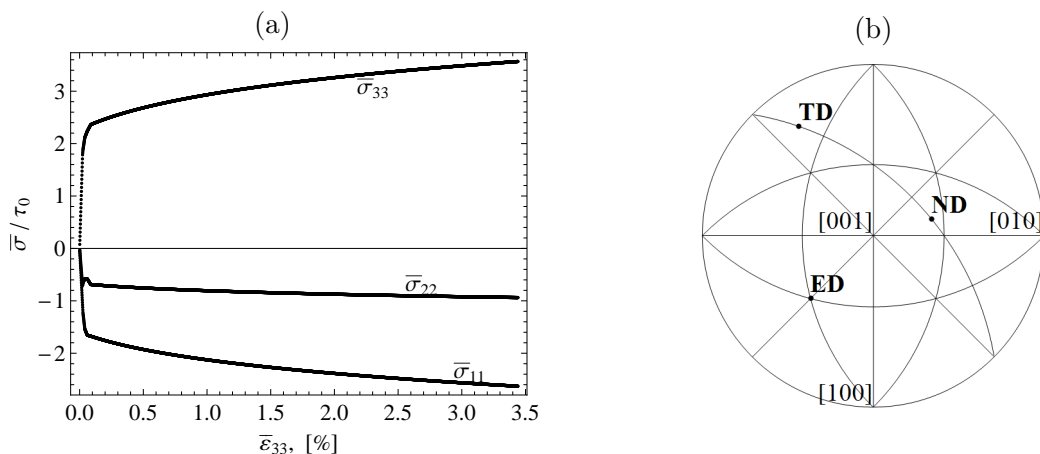
Etapu EkP jest przerywana gdy obliczone przyrosty ścinania $\Delta\gamma_{m+1}$ oraz funkcje plastyczności \mathbf{f}_{m+1} spełnią warunki aktywacji (5.3). Wówczas wartości z iteracji $(m+1)$ na etapie EkP (punkt 2 w tab. 5.13) są przypisywane poszukiwanym wartościom na końcu kroku t_{n+1} .

Przykład zastosowania algorytmu małych odkształceń w modelowaniu wydłużania kryształu

Poniżej zamieszczono wyniki dwóch z wielu analizowanych zadań testujących poprawność działania algorytmu. Zadanie polega na (trójwymiarowym) modelowaniu procesu odkształcania pojedynczego kryształu. Anizotropowy kryształ jest wydłużany wzdłuż osi ND = $\bar{\mathbf{e}}_3$ globalnego układu \bar{K}_S , przy równoczesnym zwięźaniu na kierunkach $\bar{\mathbf{e}}_1$ i $\bar{\mathbf{e}}_2$ oraz przy zachowaniu początkowej objętości, por. (5.58),

$$\Delta\bar{\boldsymbol{\varepsilon}} = \begin{pmatrix} -\frac{\Delta\lambda}{2(1+\lambda)} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta\lambda}{2(1+\lambda)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\Delta\lambda}{1-\lambda} \end{pmatrix}. \quad (5.62)$$

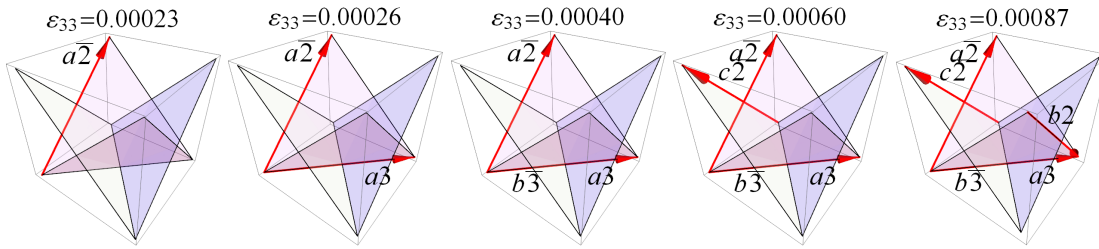
Granica plastyczności $\tau_0 = 16$ MPa jest równa początkowej wartości krytycznego naprężenia $\tau_{cr}^K = \tau_0$, gdy ścinanie $\gamma^K = 0$. Przyjęto tu wzmocnienie potęgowe w postaci (2.64) z początkowym modułem $h_0 = 180$ MPa i stałą wartością wykładnika $n = 0.16$, por. rys. 5.1(a). Składowe \mathcal{H}^{KL} macierzy modułów wzmocnienia (2.58) zależą od pojedynczego parametru wzmocnienia utajonego $q = 1.4$. Moduły sprężystości kryształu miedzi (Cu) przyjęto o wartościach $C_{11}^* = 170$ GPa, $C_{12}^* = 123$ GPa, $C_{44}^* = 75$ GPa.



Rysunek 5.1: Przebieg naprężenia względem odkształcenia do wartości $\bar{\varepsilon}_{33} = 3.5\%$ (a) oraz początkowa orientacja (T12) kierunków próbki (ND, TD, ED) (b).

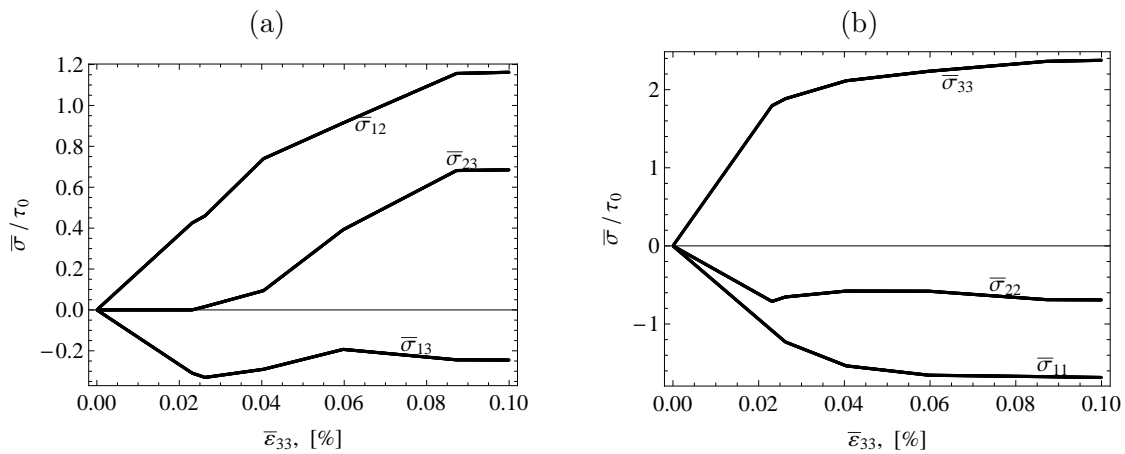
Dwa procesy deformacji modelowano z identycznymi stałymi materiałowymi. Modelowanie do końcowego odkształcenia o wartości $\bar{\varepsilon}_{33} = 3.5\%$ (rys. 5.1(a)) wykonano z przyrostem $\Delta\lambda = 10^{-4}$ i przy końcowej liczbie kroków $n_{lk} = 350$. W przypadku modelowania do $\bar{\varepsilon}_{33} = 0.1\%$ obliczenia wykonano z przyrostem $\Delta\lambda = 10^{-6}$ i przy $n_{lk} = 1000$.

Początkowa orientacja sieci kryształu jest oznaczona jako T12, por. rys. 5.1(b), gdzie 12 oznacza wartość kąta w stopniach między kierunkiem ND i [011], por. punkt 6.1.4.

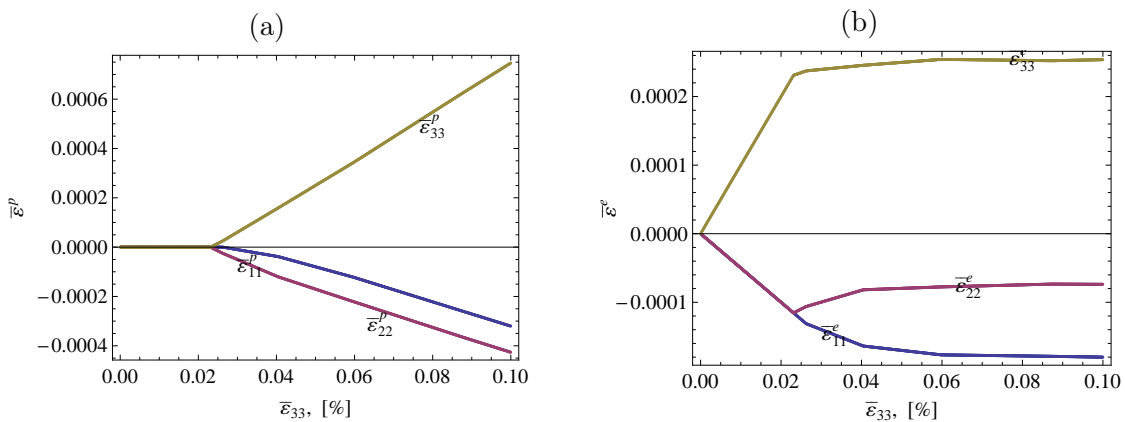


Rysunek 5.2: Postęp w uruchamianiu kolejnych systemów poślizgu (\mathbf{n}, \mathbf{m}), gdzie czerwone strzałki oznaczają wektory kierunku poślizgu na systemie aktywnym.

W trakcie procesu wydłużania, w zakresie $\bar{\varepsilon}_{33} = 0.023 \div 0.087\%$, uruchamiane są kolejne systemy począwszy od $a\bar{2}$. Systemy ($a\bar{2}, a\bar{3}, b\bar{3}, c\bar{2}, b\bar{2}$) są aktywnych do końca procesu, por. rys. 5.2. Uruchomiony przy odkształceniu $\bar{\varepsilon}_{33} = 0.04\%$ system $b\bar{3}$ (rys. 2.1(b)) jest współliniowy aktywnym systemem $a\bar{3}$. Załamania widoczne na wykresach napręże-



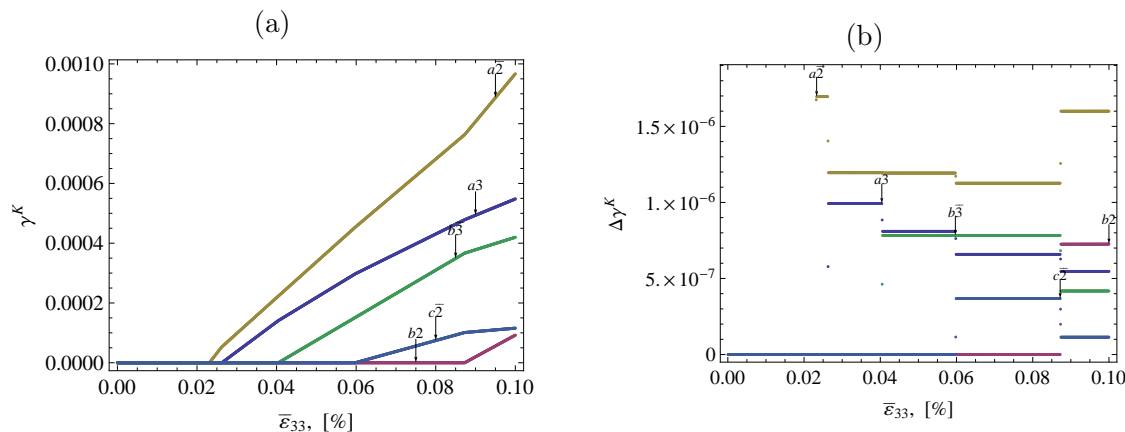
Rysunek 5.3: Przebieg naprężenia do odkształcenia o wartości $\bar{\varepsilon}_{33} = 0.1\%$: składowe $\bar{\sigma}_{23}, \bar{\sigma}_{13}, \bar{\sigma}_{12}$ (a) oraz składowe $\bar{\sigma}_{11}, \bar{\sigma}_{22}, \bar{\sigma}_{33}$ (b).



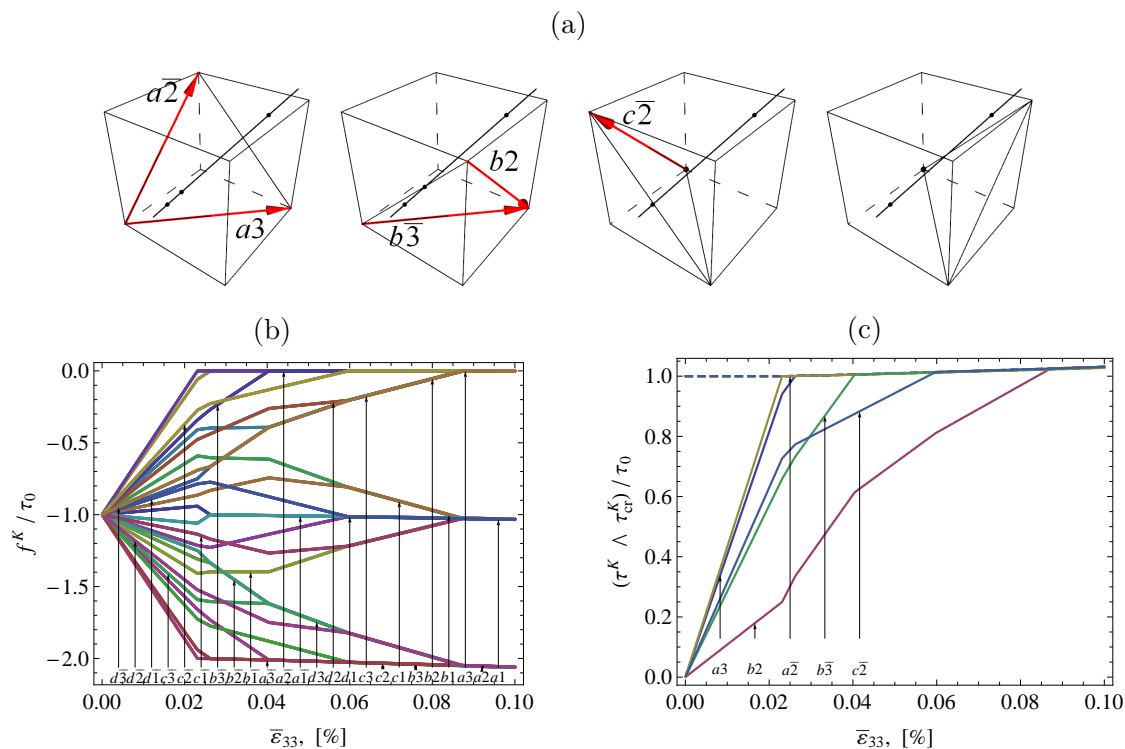
Rysunek 5.4: Krzywe odkształcenia plastycznego $\bar{\varepsilon}^p$ (a) i sprężystego $\bar{\varepsilon}^e$ (b).

nia (rys. 5.3) i odkształcenia (rys. 5.4) występują w punktach uruchamiania kolejnych

systemów poślizgu, rys. 5.2. Ten związek można zauważyć porównując wykresy naprężenia (rys. 5.3) i odkształcenia (rys. 5.4) z przebiegiem ścinania na systemach aktywnych (rys. 5.5(a)). Stałe wartości przyrostów ścinania wynikają ze stałego przyrostu deformacji w całym procesie, por. rys. 5.5(b).



Rysunek 5.5: Zmiana wartości ścinania γ^K (a) oraz wartości przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$ (b) na aktywnych systemach ($a\bar{2}$, $a3$, $b\bar{3}$, $c\bar{2}$, $b2$).



Rysunek 5.6: Systemy aktywne na końcu obciążania wraz z orientacją osi rozciągania ND (a), wartości wszystkich funkcji plastyczności f^K (b) i wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K (linie ciągłe) wraz z wartościami krytycznymi τ_{cr}^K (przerwane) (c).

Kolejność uruchamiania pięciu systemów poślizgu w orientacji T12 (rys. 5.6(a)) wynika z rosnących wartości naprężenia Schmid'a τ^K (rys. 5.6(c)) przy niewielkim umocnieniu obserwowanym w zakresie do $\bar{\epsilon}_{33} = 0.1\%$.

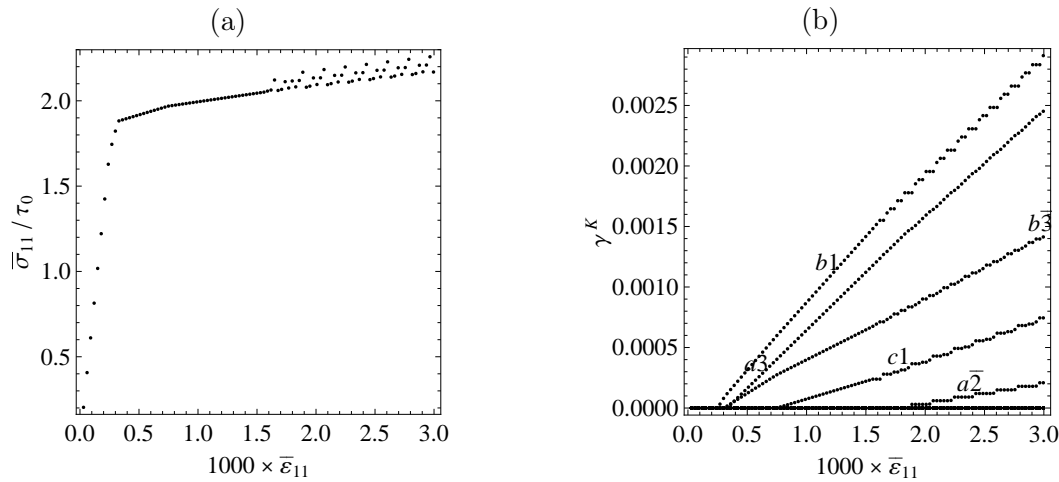
Numeryczne niestabilności występujące przy zastosowaniu algorytmu wg Simo & Hughes (1998)

Wyniki uzyskane przy użyciu algorytmu wykorzystującego minimalizację energii przyrostowej (5.61) dla małych odkształceń porównano z wynikami otrzymanymi przy użyciu algorytmu bazującego na rozwiązywaniu wprost konstytutywnego układu równań i nierówności wg pracy (Simo & Hughes, 1998).

Początkowa wartość wypadkowego krytycznego naprężenia ścinającego oraz moduły sprężystości są identyczne jak w przykładzie powyżej. Modelowane tu wzmocnienie liniowe jest ze stałym modułem samoumocnienia systemów aktywnych $h(\gamma) = h_0 = 180$ MPa oraz parametrem wzmocnienia utajonego $q = 1.4$, por. (2.58). Początkowa orientacja sieci kryształu względem układu globalnego \bar{K}_S jest wyznaczona przez kąty Eulera $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = (2/3, 1/2, 1/6)\pi$. Proces odkształcania jest realizowany przy pełnej kontroli kinematycznej poprzez zadawanie przyrostu odkształcenia w układzie \bar{K}_S w postaci

$$\Delta \bar{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta \lambda}{1-\lambda} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta \lambda}{2(1+\lambda)} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\Delta \lambda}{2(1+\lambda)} \end{pmatrix}, \quad (5.63)$$

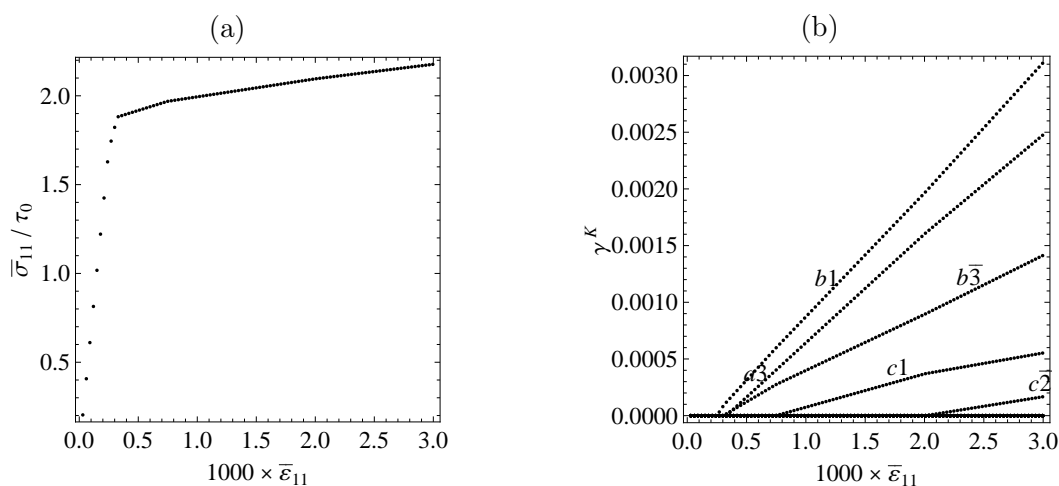
która odpowiada izochorycznemu wydłużaniu na kierunku $\bar{\mathbf{e}}_1$ w układzie \bar{K}_S . Deformacja jest modelowana przyrostowo w $n_{lk} = 100$ krokach i stałym przyroście parametru obciążania $\Delta \lambda = 3 \cdot 10^{-5}$. Proces przebiega w zakresie małych odkształceń, a końcowa wartość odkształcenia na kierunku rozciągania wynosi $\bar{\varepsilon}_{11} = 0.003$.



Rysunek 5.7: Wykres naprężenie-odkształcenie (a) obliczony przy użyciu algorytmu zaproponowanego wg (Simo & Hughes, 1998), numeryczna niestabilność ujawnia się dla $\bar{\varepsilon}_{11} > 0.0016$ oraz ścinanie na aktywnych systemach poślizgu (b).

Wyniki uzyskane przy użyciu dwóch algorytmów pokazują, że w całym procesie deformacji uruchomionych zostało pięć systemów poślizgu, wg algorytmu Simo & Hughes (1998) ($b1, a3, b\bar{3}, c1, a\bar{2}$) oraz wg algorytmu minimalizacji energii ($b1, a3, b\bar{3}, c1, c\bar{2}$). Przy zastosowaniu algorytmu wg pracy (Simo & Hughes, 1998) pojawiają się niestabilności w wynikach, widoczne na wykresach naprężenia oraz ścinania aktywnych systemów poślizgu, rys. 5.7. Obserwowane niestabilności pojawiają, gdy odkształcenie $\bar{\varepsilon}_{11} > 0.0016$, por. rys. 5.7(b). Wówczas, do zbioru płynących już czterech systemów ($b1, a3, b\bar{3}, c1$)

dołącza piąty system poślizgu $a\bar{2}$. Należy dodać, że w przypadku algorytmu wg pracy (Simo & Hughes, 1998) w żadnym kroku deformacji nie wystąpił jednoczesny poślizg na pięciu systemach. Algorytm działa niepoprawnie gdy układ równań jest rozwiązywany względem przyrostów ścinania na pięciu i większej liczby systemów. W przypadku, gdy zbiór przypuszczalnie aktywnych systemów \mathcal{P} zawiera pięć i więcej możliwych systemów pojawiają się niestabilności rozwiązania. W chwili gdy zostaje uruchamiany piąty system $c\bar{2}$, do układu równań na przyrosty dochodzi również szósty system $a\bar{2}$, widoczny na stabilnym rozwiązaniu z algorytmu minimalizacji, por. rys. 5.8(b). Niestabilność wynika z braku dodatniej określoności macierzy modułów interakcji $[g^{KL}]$ (2.84) oraz techniki eliminowania z układu równań systemów o ujemnych (numerycznie) wartościach przyrostów ścinania. Eliminacja systemów odbywa się naprzemiennie, więc z kroku na krok zmienia się zbiór aktywnych systemów \mathcal{A} . W przypadku istotnego zmniejszenia długości kroku deformacji, np. 100-krotnie, niestabilność może zanikać.



Rysunek 5.8: Wykres naprężenie-odkształcenie bez występowania numerycznej niestabilności, obliczony przy użyciu algorytmu przyrostowej minimalizacji energii (a) oraz ścinanie na pięciu aktywnych systemach poślizgu (b).

Zastosowanie proponowanego w niniejszym punkcie algorytmu przyrostowej minimalizacji energii eliminuje niestabilność niezależnie od przyjętej długości kroku (t_n, t_{n+1}), por. rys. 5.8.

5.4 Algorytm minimalizacji w przypadku deformacji z kinematycznymi stopniami swobody

W przypadku modelowania procesów deformacji kryształów takich jak jednoosiowe rozciąganie lub próba kanalikowa zachodzi konieczność zastosowania częściowych więzów kinematycznych (4.82). Na każdym kroku (t_n, t_{n+1}) przyrostowej deformacji poszukiwane są przyrosty ścinania $\Delta\gamma^K$ na systemach aktywnych oraz całkowite przyrosty gradientu deformacji $\Delta\mathbf{F}$. Przyrosty $\Delta\mathbf{F}$ dane są w postaci sumy (4.75) przyrostów zadanych $\Delta\hat{\mathbf{F}}$ oraz poszukiwanych $\Delta\tilde{\mathbf{F}}$. Sterowanie procesem deformacji odbywa się przy pomocy znanego przyrostu gradientu deformacji $\Delta\hat{\mathbf{F}} = \Delta\hat{\mathbf{F}}(\Delta\lambda)$. Na każdym kroku przyrostowej deformacji poszukiwana jest para $(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})$. Poszukiwane przyrosty $(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})$ muszą

spełniać przyrostowe warunki aktywacji (5.3), w sposób dyskretny na końcu kroku deformacji t_{n+1} , oraz ograniczenia wynikające z nałożonych kinematycznych stopni swobody (4.82).

W niniejszym punkcie pominięto rozróżnienie na gradient deformacji względem układu globalnego \bar{K}_S i lokalnego K_C .

Etap Sprężysto-Plastyczny (ESP)

Na etapie ESP poszukiwane są wartości $\Delta\gamma^K$ i f_{n+1}^K przy spełnieniu dyskretnego warunku aktywacji (5.3) oraz przyrost $\Delta\tilde{\mathbf{F}}$ przy spełnieniu więzów (4.82), na końcu każdego z kroków deformacji t_{n+1} . Analogicznie do algorytmu z pełnymi więzami kinematycznymi etap ESP składa się z etapu próbnego EpS oraz etapu korygującego EkP, por. tab. 5.14.

Etap EpS wyznaczany jest na początku każdego kroku przyrostowej deformacji, przy założeniach $\Delta\mathbf{F} = \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} = \Delta\hat{\mathbf{F}}$, $\Delta\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$ i $\Delta\gamma_{\text{trial}}^K = 0$. Podczas etapu EpS wyznaczane są próbne wartości $(\mathbf{S}_{\text{trial}}, f_{\text{trial}}^K)$.

Natomiast na korygującym etapie EkP, w pętli iteracyjnej, obliczane są przyrosty deformacji i ścinania, dla znanych z etapu EpS wartości próbnych $(\mathbf{S}_{\text{trial}}, f_{\text{trial}}^K)$. Obliczone przyrosty $(\Delta\gamma^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}})$ muszą spełnić dyskretny warunek aktywacji (5.3) dla pary $(\Delta\gamma^K, f_{n+1}^K)$ oraz ograniczenia wynikające z więzów kinematycznych (4.82) nakładanych na przyrost $\Delta\mathbf{F}$.

Tablica 5.14: Podział etapu sprężysto-plastycznego (ESP), częściowe więzy kinematyczne.

Próbny etap sprężysty (EpS)	oraz	korygujący etap plastyczny (EkP)
dla $\Delta\lambda \neq 0$ i $\Delta\gamma_{\text{trial}}^K = 0$		dla $(\mathbf{S}_{\text{trial}}, f_{\text{trial}}^K)$
$\Delta\mathbf{F} = \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}}, \Delta\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$		$\Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} = \mathbf{0}$
oblicz $(\mathbf{S}_{\text{trial}}, f_{\text{trial}}^K)$		oblicz $\Delta\tilde{\mathbf{F}}, \Delta\gamma^K \geq 0$ i $(\mathbf{S}_{n+1}, f_{n+1}^K \leq 0)$
oraz $\mathcal{P}_{\text{trial}}$ jeśli $f_{\text{trial}}^K \geq 0$		oraz \mathcal{A}_{n+1} dla $\Delta\gamma^K > 0$

Próbny Etap Sprężysty (EpS)

Próbne wartości naprężeń $\mathbf{S}_{\text{trial}}$ i funkcji plastyczności f_{trial}^K wynikają z próbnej czysto sprężystej deformacji. Wówczas przyrost gradientu deformacji wynosi $\Delta\mathbf{F} = \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}}$, a przyrost ścinania $\Delta\gamma^K = \Delta\gamma_{\text{trial}}^K = 0$. Próbne wartości $\mathbf{S}_{\text{trial}}$ i f_{trial}^K są wyznaczane raz dla danego kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) ,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\text{trial}} &= \mathbf{S}_n + \mathbb{A}_{n=\text{trial}} \cdot \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}}, \\ f_{\text{trial}}^K &= f_n^K + \mathbb{A}_{n=\text{trial}}^K \cdot \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}}. \end{aligned} \quad (5.64)$$

Wartości $\mathbb{A}_{\text{trial}}$ i $\mathbb{A}_{\text{trial}}^K$ są przyjmowane z końca poprzedniego kroku t_n . Próbny przyrost gradientu deformacji jest przyjmowany w postaci przyrostu części sterowalnej $\Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} = \Delta\hat{\mathbf{F}}$.

W przypadku, gdy wyznaczony w etapie EpS stan naprężenia przekracza powierzchnie plastyczności, przy spełnieniu częściowych więzów kinematycznych, zostaje uruchamiany korygujący etap plastyczny (EkP).

Korygujący Etap Plastyczny (EkP)

Na etapie EkP przyrost gradientu deformacji $\Delta\mathbf{F}$ jest w postaci sumy

$$\Delta\mathbf{F} = \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} + \Delta\tilde{\mathbf{F}}, \quad (5.65)$$

przyrostu $\Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} = \Delta\hat{\mathbf{F}}$ zadanego na próbnym etapie sprężystym (EpS) oraz szukanego przyrostu $\Delta\tilde{\mathbf{F}}$ obliczanego podczas etapu EkP.

Etap EkP obejmuje iteracyjną aktualizację przyrostów $(\Delta\gamma_{m+1}^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}}_{m+1})$ w postaci

$$\Delta\gamma_{m+1}^K = \Delta\gamma_m^K + \Delta^2\gamma^K, \quad (5.66)$$

$$\Delta\tilde{\mathbf{F}}_{m+1} = \Delta\tilde{\mathbf{F}}_m + \Delta^2\tilde{\mathbf{F}}, \quad (5.67)$$

gdzie $(\Delta^2\gamma^K, \Delta^2\tilde{\mathbf{F}})$ oznaczają korygujące przyrosty 2-go rzędu ścinania i gradientu deformacji przypadające na odcinek $(m, m+1)$. Indeks (m) oznacza numer iteracji pętli korygującej w ustalonym przyrostowym kroku obciążania (t_n, t_{n+1}) .

W startowej iteracji etapu EkP (gdzie $m=0$) ustalane są wartości przyrostu ścinania $\Delta\gamma_m^K = 0$ oraz gradientu deformacji $\Delta\tilde{\mathbf{F}}_m = \mathbf{0}$. Natomiast w kolejnych iteracjach korygującej pętli $(m+1)$ obliczane są przyrosty $(\Delta\gamma_{m+1}^K, \Delta\tilde{\mathbf{F}}_{m+1})$. Korygująca pętla na etapie EkP jest przerywana jeżeli obliczone wartości $(\Delta\gamma_{m+1}^K, f_{m+1}^K)$ spełniają warunki aktywacji, a obliczone naprężenie \mathbf{S}_{m+1} spełnia ograniczenia wynikające z nałożonych więzów. Po spełnieniu ograniczeń, następuje wyznaczenie wartości poszukiwane na końcu kroku: $\mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_{m+1}$ i $f_{n+1}^K = f_{m+1}^K$.

Minimalizacja energii przyrostowej (4.79) wykonywana będzie względem korygujących przyrostów 2-go rzędu $(\Delta^2\gamma^K, \Delta^2\tilde{\mathbf{F}})$. W tym celu zostanie wyznaczona postać przyrostu energii, która jawnie zależy od poszukiwanych korygujących przyrostów 2-go rzędu.

Podstawienie przyrostów (5.66) do przyrostowych związków konstytutywnych (5.2) umożliwi wyznaczenie naprężenia i funkcji plastyczności dla korygującej iteracji $(m+1)$

$$\mathbf{S}_{m+1} = \mathbf{S}_m + \mathbb{A}_m \cdot \Delta^2\tilde{\mathbf{F}} - \sum_K \mathbf{\Lambda}_m^K \Delta^2\gamma^K, \quad (5.68)$$

$$f_{m+1}^K = f_m^K + \mathbf{\Lambda}_m^K \cdot \Delta^2\tilde{\mathbf{F}} - \sum_L g_m^{KL} \Delta^2\gamma^L,$$

gdzie wartości $(\Delta^2\gamma^K, \Delta^2\tilde{\mathbf{F}})$ są nieznane, a wartości $\mathbb{A}_m, \mathbf{\Lambda}_m^K, g_m^{KL}$ zostały obliczone z poprzedniej iteracji (m) . Analogicznie wartości naprężenia \mathbf{S}_m i funkcji plastyczności f_m^K można wyznaczyć dla iteracji (m) w postaci

$$\mathbf{S}_m = \mathbf{S}_{\text{trial}} + \mathbb{A}_m \cdot \Delta\tilde{\mathbf{F}}_m - \sum_K \mathbf{\Lambda}_m^K \Delta\gamma_m^K, \quad (5.69)$$

$$f_m^K = f_{\text{trial}}^K + \mathbf{\Lambda}_m^K \cdot \Delta\tilde{\mathbf{F}}_m - \sum_L g_m^{KL} \Delta\gamma_m^L.$$

$\mathbb{A}_m, \mathbf{\Lambda}_m^K$ i g_m^{KL} dla startowej iteracji $m=0$ są wyznaczane przy użyciu wartości z końca poprzedniego kroku t_n . W iteracji $m=0$ przyrost ścinania $\Delta\gamma_{m=0}^K = 0$ i gradientu deformacji $\Delta\tilde{\mathbf{F}}_{m=0} = \mathbf{0}$, stąd wartości naprężenia $\mathbf{S}_{m=0} = \mathbf{S}_{\text{trial}}$ i funkcji plastyczności $f_{m=0}^K = f_{\text{trial}}^K$ odpowiadają wartościom próbnym, por. (5.64).

Przyrostowe związki (5.68) umożliwiają wyznaczenie wyrażenia na przyrost energii minimalizowanej w iteracjach korygujących etapu EkP (dla ustalonego kroku deformacji (t_n, t_{n+1})). Wzór na przyrost energii w iteracji $(m, m+1)$ został wyznaczony ze wzoru na

całkowity przyrost energii na kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) (4.76), przy użyciu związków na wartości naprężenia i funkcji plastyczności w iteracjach (m) (5.69) i $(m+1)$ (5.68). Następnie uwzględniono przyrosty ścinania $\Delta\gamma_{m+1}^K$ (5.66) oraz przyrost gradientu deformacji $\Delta\mathbf{F}_{m+1} = \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} + \Delta\tilde{\mathbf{F}}_m + \Delta^2\tilde{\mathbf{F}}$, wg (5.65) i (5.67), oraz odrzucono wielkości niezależne od szukanych przyrostów 2-go rzędu.

Minimalizowany przyrost energii jest w postaci

$$\begin{aligned} \Delta w = & \mathbf{S}_m \cdot \Delta^2\tilde{\mathbf{F}} + \frac{1}{2}\Delta^2\tilde{\mathbf{F}} \cdot \mathbb{A}_m \cdot \Delta^2\tilde{\mathbf{F}} - \sum_{K \in \mathcal{A}} \Lambda_m^K \Delta^2\gamma^K \cdot \Delta^2\tilde{\mathbf{F}} + \\ & - \sum_{K \in \mathcal{A}} f_m^K \Delta^2\gamma^K + \frac{1}{2} \sum_{KL \in \mathcal{A}} g_m^{KL} \Delta^2\gamma^K \Delta^2\gamma^L. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Minimalizacja przyrostu energii (5.70) odbywa się względem przyrostów drugiego rzędu $(\Delta^2\gamma^L, \Delta^2\tilde{\mathbf{F}})$, wewnątrz iteracyjnej pętli korygującej. Na każdej iteracji zostają obliczone poszukiwane korygujące przyrosty przez minimalizację przyrostu energii (5.70) z ograniczeniami na całkowite przyrosty ścinania $\Delta\gamma_{m+1}^L$.

Tablica 5.15: Część algorytmu aktualizacji z kinematycznymi stopniami swobody.

Aktualizacja w EkP (+ kinematyczne stopnie swobody)	
0.	DANE: $\Delta^2\gamma_{m+1}, \Delta^2\mathbf{F}_{m+1}, \gamma_n, \mathbf{F}_{\text{trial}}, \mathbf{F}_n^P$, Stałe: $\mathbf{s}_{(24 \times 9)}, \mathbb{C}_{(9 \times 9)}^*$
1.	Aktualizacja: <div style="text-align: center;"> \vdots $\Delta\mathbf{F}_{m+1} = \Delta\mathbf{F}_{\text{trial}} + \Delta\tilde{\mathbf{F}}_m + \Delta^2\tilde{\mathbf{F}}$ $\mathbf{F}_{m+1} = \mathbf{F}_{\text{trial}} + \Delta\mathbf{F}_{m+1}$ \vdots </div>
2.	KOŃCOWE: $(\mathbf{F}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{S}, \mathbf{q}, \mathbf{g}, \mathbf{f})_{m+1}$

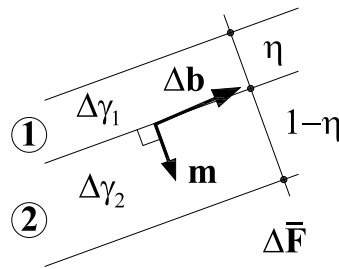
Algorytm aktualizacji wszystkich poszukiwanych wartości (tab. 5.15), dla obliczonych przyrostów $\Delta^2\gamma^K$ i $\Delta^2\mathbf{F}$, zawiera dwa równania dodatkowe w stosunku do zestawu równań algorytmu bez kinematycznych stopni swobody, por. tab. 5.5.

5.5 Algorytm minimalizacji w przypadku niejednorodnej deformacji

Niniejszy podrozdział zawiera algorytm przyrostowej minimalizacji energii dla skończonego kroku deformacji z dopuszczeniem możliwości podziału na dwa podziarna $s = 1, 2$ (4.4.2). Do modelu jednorodnego kryształu wprowadzone zostały dodatkowe stopnie swobody (ponad stopnie wynikające z częściowych więzów kinematycznych) umożliwiające modelowanie podziału. W celu uproszczenia rozważane jest sterowanie procesem deformacji przy pełnej kontroli kinematycznej makroskopowego (uśrednionego) gradientu deformacji (4.86). Przyrost makroskopowego gradientu na kroku deformacji (t_n, t_{n+1}) jest w postaci $\Delta\bar{\mathbf{F}} = \Delta\hat{\tilde{\mathbf{F}}}$, natomiast człon zawierający przyrosty niewiadomych składowych to $\Delta\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$.

W niniejszym punkcie pominięto rozróżnienie gradientów deformacji względem układu globalnego \bar{K}_S i lokalnego K_C

Minimalizacja energii przyrostowej $\Delta\bar{w}$ podczas procesów deformacji materiału modelowanego jako laminat pierwszego rzędu (podrozdział 4.4.2), przy zastosowaniu pełnych więzów kinematycznych, jest w formie zadania (4.97). Wektor niewiadomych $\mathbf{x} = (\Delta\gamma_1^K, \Delta\gamma_2^L, \Delta\mathbf{b}; \eta, \mathbf{m})$ zawiera przyrosty ścinania podziarna 1 i 2, przyrost wektora \mathbf{b} , wektor rozdziału \mathbf{m} i udział objętościowy η , por. rys 5.9. Przyrost makroskopowej energii $\Delta\bar{w}$ jest w postaci liniowej kombinacji przyrostów energii Δw_s podziarna nr s , por. (4.95). Przyrost energii $\Delta\bar{w}$, minimalizowany na skończonym kroku przyrostowej deformacji (t_n, t_{n+1}) , został wyznaczony przez zadany przyrost gradientu makroskopowego $\Delta\bar{\mathbf{F}}$ w formie (4.96).



Rysunek 5.9: Schemat mikrostruktury wraz z poszukiwanymi wielkościami $(\Delta\gamma_1^K, \Delta\gamma_2^L, \Delta\mathbf{b}; \eta, \mathbf{m})$.

W punktach t_n oraz t_{n+1} zadana jest jest deformacja makroskopowa materiału, odpowiednio $\bar{\mathbf{F}}_n$ i $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$. Szukane na kroku (t_n, t_{n+1}) przyrosty całkowitych gradientów deformacji podziaren $\Delta\mathbf{F}_s = \mathbf{F}_{s,n+1} - \mathbf{F}_{s,n}$ zależą od niewiadomych $(\Delta\mathbf{b}; \eta, \mathbf{m})$. Natomiast wartości naprężenia $\mathbf{S}_{s,n+1}$ oraz funkcji plastyczności $f_{s,n+1}^K$ na końcu kroku zależą dodatkowo od przyrostów ścinania $\Delta\gamma_s^K$ w dwóch podziarnach.

W tym podejściu, wartości η i \mathbf{m} są obliczane w chwili nastąpienia podziału ziarna, a następnie traktowane jako znane i stałe w całym modelowanym procesie deformacji. Obliczone, w jednym z kroków obciążania, wartości udziału η i wektora rozdziału \mathbf{m} nie podlegają przyrostowej aktualizacji. Orientacja wektora rozdziału podziaren \mathbf{m} została wyznaczona przy użyciu kątów (ψ, ϕ) w postaci

$$\mathbf{m} = \{\cos \psi \cos \phi, \cos \psi \sin \phi, \sin \psi\}. \quad (5.71)$$

W przypadku, gdy nastąpił podział ziarna i znany jest udział objętościowy $\eta \neq 0$ oraz orientacja wektora \mathbf{m} , niewiadomym stopniem swobody laminatu pozostaje wektor \mathbf{b} .

Przyrosty gradientów deformacji można przedstawić, z wykorzystaniem wzorów (4.88) i (4.89), w postaci

$$\Delta\mathbf{F}_1 = \Delta\bar{\mathbf{F}} + (1 - \eta) \Delta\mathbf{b} \otimes \mathbf{m}, \quad (5.72)$$

$$\Delta\mathbf{F}_2 = \Delta\bar{\mathbf{F}} - \eta \Delta\mathbf{b} \otimes \mathbf{m}.$$

Na kolejnych krokach przyrostowej deformacji poszukiwany jest przyrost $\Delta\mathbf{b}$, który umożliwi aktualizację wartości wektora $\mathbf{b}_{n+1} = \mathbf{b}_n + \Delta\mathbf{b}$ na końcu kroku deformacji t_{n+1} .

Etapy algorytmu przyrostowej deformacji

Analogicznie do poprzednich algorytmów, etap sprężysto-plastyczny (ESP) został podzielony na próbny etap sprężysty (EpS) oraz korygujący etap plastyczny (EkP).

W etapie EpS próbne wartości przyrostów gradientów deformacji podziaren s są wyznaczone przy założeniu $\Delta \mathbf{b} = \mathbf{0}$ oraz wykorzystaniu związków (5.72),

$$\Delta \mathbf{F}_{1,\text{trial}} = \Delta \mathbf{F}_{2,\text{trial}} = \Delta \bar{\mathbf{F}}. \quad (5.73)$$

Analogicznie do poprzednich algorytmów, w etapie EkP została wprowadzona linearyzacja, więc poszukiwane są wartości niewiadomych przyrostów korygujących drugiego rzędu: $\Delta^2 \gamma_s^K$, $\Delta^2 \mathbf{b}$, $\Delta^2 \mathbf{F}_s$. W pętli korygującej wyznaczone są wartości przyrostów $\Delta \gamma_{s,m+1}^K$, $\Delta \mathbf{b}_{m+1}$, $\Delta \mathbf{F}_{s,m+1}$ w postaci

$$\begin{aligned} \Delta \gamma_{s,m+1}^K &= \Delta \gamma_{s,m}^K + \Delta^2 \gamma_s^K, \\ \Delta \mathbf{b}_{m+1} &= \Delta \mathbf{b}_m + \Delta^2 \mathbf{b}, \\ \Delta \mathbf{F}_{s,m+1} &= \Delta \mathbf{F}_{s,m} + \Delta^2 \mathbf{F}_s, \end{aligned} \quad (5.74)$$

gdzie indeks (m) oznacza wielkości z poprzedniej iteracji. W iteracji $m = 0$ wartości przyrostów są przyjmowane jako $\Delta \gamma_{s,m=0}^K = \Delta \gamma_{s,\text{trial}}^K = 0$, $\Delta \mathbf{b}_{m=0} = \Delta \mathbf{b}_{\text{trial}} = \mathbf{0}$, więc przy użyciu związków (5.72) można wyznaczyć równości przyrostów $\Delta \mathbf{F}_{s,m=0} = \Delta \mathbf{F}_{s,\text{trial}} = \Delta \bar{\mathbf{F}}$.

Poszukiwany przyrost drugiego rzędu $\Delta^2 \mathbf{F}_s$ podziarna s , jest wyrażony poprzez nieznaną przyrost $\Delta^2 \mathbf{b}$ w postaci

$$\begin{aligned} \Delta^2 \mathbf{F}_1 &= (1 - \eta) \Delta^2 \mathbf{b} \otimes \mathbf{m}, \\ \Delta^2 \mathbf{F}_2 &= -\eta \Delta^2 \mathbf{b} \otimes \mathbf{m}. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Natomiast przyrosty gradientów deformacji podziaren $\Delta \mathbf{F}_{s,m}$ wyznaczone w poprzedniej iteracji są znane,

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{F}_{1,m} &= \Delta \mathbf{F}_{1,\text{trial}} + (1 - \eta) \Delta \mathbf{b}_m \otimes \mathbf{m}, \\ \Delta \mathbf{F}_{2,m} &= \Delta \mathbf{F}_{2,\text{trial}} - \eta \Delta \mathbf{b}_m \otimes \mathbf{m}. \end{aligned} \quad (5.76)$$

Wartości naprężenia $\mathbf{S}_{s,m+1}$ i funkcji plastyczności $f_{s,m+1}^K$, dla iteracji ($m + 1$) pętli korygującej, zostały wyznaczone przy użyciu wzorów (5.2) i (5.74), w postaci

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{s,m+1} &= \mathbf{S}_{s,m} + \mathbb{A}_{s,m} \cdot \Delta^2 \mathbf{F}_s - \sum_K \mathbf{\Lambda}_{s,m}^K \Delta^2 \gamma_s^K, \\ f_{s,m+1}^K &= f_{s,m}^K + \mathbf{\Lambda}_{s,m}^K \cdot \Delta^2 \mathbf{F}_s - \sum_L g_{s,m}^{KL} \Delta^2 \gamma_s^L, \end{aligned} \quad (5.77)$$

gdzie przyrost gradientu deformacji podziarna s : $\Delta^2 \mathbf{F}_s = \Delta^2 \mathbf{F}_s(\Delta^2 \mathbf{b})$. Wartości naprężeń $\mathbf{S}_{s,m}$ i funkcji plastyczności $f_{s,m}^K$ z poprzedniej iteracji (m) są w postaci

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{s,m} &= \mathbf{S}_{s,\text{trial}} + \mathbb{A}_{s,m} \cdot \Delta \mathbf{F}_{s,m} - \sum_K \mathbf{\Lambda}_{s,m}^K \Delta \gamma_{s,m}^K, \\ f_{s,m}^K &= f_{s,\text{trial}}^K + \mathbf{\Lambda}_{s,m}^K \cdot \Delta \mathbf{F}_{s,m} - \sum_L g_{s,m}^{KL} \Delta \gamma_{s,m}^L. \end{aligned} \quad (5.78)$$

Wartości naprężeń i funkcji plastyczności obliczane w startowej iteracji $m = 0$ odpowiadają wartościom próbnym:

$$\begin{aligned}\mathbf{S}_{s,m=0} &= \mathbf{S}_{s,\text{trial}} = \mathbf{S}_{s,n} + \mathbb{A}_{s,m} \cdot \Delta \mathbf{F}_{s,\text{trial}}, \\ f_{s,m=0}^K &= f_{s,\text{trial}}^K = f_{s,n}^K + \Lambda_{s,m}^K \cdot \Delta \mathbf{F}_{s,\text{trial}}.\end{aligned}\quad (5.79)$$

Energia przyrostowa w etapie EkP

Przyrost energii dla podziarna s został wyznaczony z wykorzystaniem związków (5.74), (5.77), (5.78) oraz (5.79). Przyrost energii makroskopowej $\Delta \bar{w}$ laminatu dwufazowego (4.95) ma postać

$$\Delta \bar{w} = \eta \Delta w_1 + (1 - \eta) \Delta w_2, \quad (5.80)$$

gdzie przyrost energii Δw_s podziarna s :

$$\begin{aligned}\Delta w_s &= \mathbf{S}_{s,m} \cdot \Delta^2 \mathbf{F}_s + \frac{1}{2} \Delta^2 \mathbf{F}_s \cdot \mathbb{A}_{s,m} \cdot \Delta^2 \mathbf{F}_s + \\ &\quad - \sum_K \Lambda_{s,m}^K \Delta^2 \gamma_s^K \cdot \Delta^2 \mathbf{F}_s + \\ &\quad - \sum_{K \in \mathcal{A}_m} f_{s,m}^K \Delta^2 \gamma_s^K + \frac{1}{2} \sum_{KL \in \mathcal{A}_m} g_{s,m}^{KL} \Delta^2 \gamma_s^K \Delta^2 \gamma_s^L.\end{aligned}\quad (5.81)$$

Korygujący Etap Plastyczny (EkP)

Etap EkP algorytmu zawiera minimalizację przyrostu energii ziarna w postaci laminatu 1-go rzędu $\Delta \bar{w}$ wykonywaną wewnątrz pętli (korygującej). Po obliczeniu wartości przyrostów korygujących, zostają aktualizowane wartości przyrostu wektora $\Delta \mathbf{b}_{m+1}$ oraz przyrosty ścinania $\Delta \gamma_{1,m+1}^K, \Delta \gamma_{2,m+1}^L$.

Inicjalizacja wielkości początkowych w iteracji $m = 0$ jest wykonywana dla dwóch podziaren s niezależnie: $\mathbf{S}_{m=0} = \mathbf{S}_{\text{trial}}$, $\boldsymbol{\tau}_{m=0} = \boldsymbol{\tau}_{\text{trial}}$, $\Delta \gamma_{m=0}^K = 0$, $\mathcal{A}_{m=0} = \mathcal{P}_{\text{trial}}$, $\mathbf{F}_{m=0}^* = \mathbf{F}_{\text{trial}}^*$, $\mathbf{F}_{m=0}^P = \mathbf{F}_n^P$, $q_{m=0}^K = q_n^K$, $\mathbf{m}_{m=0}^{*K} = \mathbf{m}_{\text{trial}}^{*K}$, $\mathbf{n}_{m=0}^{*K} = \mathbf{n}_{\text{trial}}^{*K}$, $f_{m=0}^K = f_{\text{trial}}^K$. Następnie wyznaczane są wartości modułów sprężystości $\mathbb{A}_{m=0} = \mathbb{A}_{\text{trial}}$, kierunków naprężeń niesprężystych $\Lambda_{m=0}^K = \Lambda_{\text{trial}}^K$ i macierzy modułów interakcji $g_{m=0}^{KL} = g_n^{KL}$.

Wartość całkowitego makroskopowego gradientu deformacji $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}$ jest zadana na końcu kroku t_{n+1} .

Minimalizacja energii przyrostowej względem przyrostów $(\Delta^2 \gamma_1^K, \Delta^2 \gamma_2^L, \Delta^2 \mathbf{b})$ oraz (η, \mathbf{m}) odbywa się na etapie od pierwszego kroku deformacji do kroku, w którym następuje podział na podziarna. W przypadku, gdy nastąpi podział, obliczone wartości udziału objętościowego η i orientacja wersora \mathbf{m} są traktowane jako stałe do końca procesu deformacji. Wówczas, w iteracji $(m, m+1)$ minimalizacja przyrostu energii dla laminatu o ustalonych wartościach (η, \mathbf{m}) jest w postaci

$$(\Delta^2 \gamma_1^K, \Delta^2 \gamma_2^L, \Delta^2 \mathbf{b}) \longleftarrow \min_{\substack{\Delta^2 \gamma_1^K \geq 0, \Delta^2 \gamma_2^L \geq 0, \Delta^2 \mathbf{b} \\ K, L \in \mathcal{A}_m}} (\Delta \bar{w}), \quad (5.82)$$

gdzie przyrost energii $\Delta \bar{w}$ (5.80) jest w postaci kombinacji liniowej przyrostów energii podziaren (5.81), a przyrosty gradientów deformacji podziaren (5.75) zależą od nieznanego przyrostu $\Delta^2 \mathbf{b}$.

Aktualizacja (tab. 5.5) wartości dla iteracji $(m + 1)$ jest wykonywana analogicznie do poprzednich algorytmów, przy czym zawiera dodatkowe równania w postaci

$$\begin{array}{l}
 \mathbf{b}_{m+1} = \mathbf{b}_{m=0} + \Delta \mathbf{b}_{m+1}, \quad \text{gdzie} \quad \Delta \mathbf{b}_{m+1} = \Delta \mathbf{b}_m + \Delta^2 \mathbf{b}, \\
 \text{Podziarno 1: } \mathbf{F}_{1,m+1} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1} + (1 + \eta) \mathbf{b}_{m+1} \otimes \mathbf{m}, \\
 \text{lub} \\
 \text{Podziarno 2: } \mathbf{F}_{2,m+1} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1} - \eta \mathbf{b}_{m+1} \otimes \mathbf{m}.
 \end{array} \tag{5.83}$$

W przypadku modelowania podziału na podziarna aktualizacja jest wykonywana dla każdego podziarna s niezależnie.

Jeżeli dla wszystkich powierzchni plastyczności f^K podziarna 1 i podziarna 2 zostaną spełnione dyskretne warunki aktywacji (5.3), to korygujący etap plastyczny (EkP) jest przerywany. Obliczone wartości z ostatniej wykonanej iteracji $(m + 1)$ są przekazywane na koniec kroku t_{n+1} : $\mathbf{S}_{n+1} = \mathbf{S}_{m+1}$, $\boldsymbol{\tau}_{n+1} = \boldsymbol{\tau}_{m+1}$, $\gamma_{n+1}^K = \gamma_{m+1}^K$, $\mathcal{A}_{n+1} = \mathcal{A}_{m+1}$, $\mathbf{F}_{n+1} = \mathbf{F}_{m+1}$, $\mathbf{F}_{n+1}^* = \mathbf{F}_{m+1}^*$, $\mathbf{F}_{n+1}^P = \mathbf{F}_{m+1}^P$, $q_{n+1}^K = q_{m+1}^K$, $\mathbf{m}_{n+1}^{*K} = \mathbf{m}_{m+1}^{*K}$, $\mathbf{n}_{n+1}^{*K} = \mathbf{n}_{m+1}^{*K}$, $f_{n+1}^K = f_{m+1}^K$.

Rozdział 6

Wyniki modelowania procesów deformacji kryształów

Wyniki numerycznego modelowania procesów deformacji zamieszczone w niniejszym rozdziale dotyczą kryształów o sieci typu r.s.c.. Modelowanie przeprowadzono przy zastosowaniu metody minimalizacji energii przyrostowej (4.39) oraz algorytmów typu lagrange’owskiego (5.3), (5.4) i (5.5). W celu symetryzacji zagadnienia konstytutywnego zastosowano metodę selektywnej symetryzacji (3.13) macierzy modułów interakcji aktywnych systemów poślizgu.

6.1 Modelowanie deformacji bez uwzględnienia podziału ziarna

Zamieszczone wyniki modelowania prostego ścinania ukazują zarówno działanie proponowanych algorytmów jak i skomplikowany charakter zjawisk zachodzących w kryształach w zakresie dużych sprężysto-plastycznych deformacji.

6.1.1 Pełna kontrola kinematyczna. Proste ścinanie

Proste ścinanie jest modelowane przy pełnym kinematycznym sterowaniu. Zadany gradient deformacji całkowitej $\mathbf{F}(\lambda)$ jest funkcją parametru obciążania λ , tak że $\mathbf{F} = \tilde{\mathbf{F}}$ oraz $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$, por. punkt 4.3.4. Proces prostego ścinania jest sterowany przy użyciu gradientu deformacji w postaci sumy

$$\mathbf{F}(\lambda) = \mathbf{1} + \lambda \mathbf{M} \otimes \mathbf{N}, \quad (6.1)$$

tensora jednostkowego $\mathbf{1}$ i diady wersorów określających kierunek \mathbf{M} oraz płaszczyznę \mathbf{N} prostego ścinania.

Na tym etapie analizy, ukazującym działanie algorytmu dużych deformacji, zostały przyjęte „standardowe” wartości modułów sprężystości i plastyczności. Początkowa wartość granicy plastyczności wynosi $\tau_0 = 16$ MPa. Funkcja określająca wzmocnienie systemów została przyjęta w postaci prawa potęgowego (2.64), gdzie początkowa wartość modułu wzmocnienia $h_0 = 180$ MPa, a stała w wykładniku prawa potęgowego $n = 0.16$. Wartości składowych macierzy modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} przyjęto w klasycznej postaci tzw. prostego prawa wzmocnienia utajonego (2.58), gdzie szybsze wzmocnienie

wszystkich systemów nieaktywnych określa parametr $q = 1.4$. Moduły sprężystości kryształu Cu przyjęto o wartościach $C_{11}^* = 170$ GPa, $C_{12}^* = 123$ GPa, $C_{44}^* = 75$ GPa, por. (Schmid & Boas, 1950).

Przyrost parametru obciążania $\Delta\lambda = 10^{-2}$ jest stały w całym procesie deformacji. Końcowa wartość parametru $\lambda = 10$ została osiągnięta w ostatnim kroku podstawowej pętli obciążania (tab. 5.2), o numerze $n_{lk} = 1000$. Wyniki modelowania zamieszczone poniżej dotyczą wybranych czterech początkowych orientacjach sieci kryształu (tab. 6.1). Na skutek stosunkowo długiego przyrostu $\Delta\lambda$ oraz niskiej wartości τ_0 , już w pierwszym kroku pętli obciążania zostały uruchamianie systemów poślizgu dla czterech orientacji, które analizowano poniżej.

Wybrane orientacje sieci w teście prostego ścinania

Kryształ podlega prostemu ścinaniu w płaszczyźnie $\bar{X}_1\text{-}\bar{X}_3$ (w skrócie 1-3) układu globalnego \bar{K}_S . Gradient deformacji $\mathbf{F}(\lambda)$ (6.1) określa ścinanie w płaszczyźnie $\mathbf{N} = \bar{\mathbf{e}}_3$ i na kierunku $\mathbf{M} = \bar{\mathbf{e}}_1$.

Modelowanie procesu deformacji przeprowadzono przy wybranych czterech początkowych orientacjach sieci kryształu, por. rys. 6.1. Przy użyciu macierzy obrotu $[\mathbf{Q}^R]$ sieć kryształu została wstępnie obrócona względem układu globalnego \bar{K}_S . Macierz $[\mathbf{F}]$ składowych gradientu deformacji (5.16) w układzie lokalnym K_C , związanym z początkową orientacją sieci, można zapisać w postaci (równoważnej 5.17)

$$[\mathbf{F}] = [\mathbf{Q}^R] [\bar{\mathbf{F}}(\lambda)] [\mathbf{Q}^R]^T. \quad (6.2)$$

Składowe wersorów $[\mathbf{M}]_{(3)} = [\mathbf{Q}^R] [\bar{\mathbf{M}}]$ i $[\mathbf{N}]_{(3)} = [\mathbf{Q}^R] [\bar{\mathbf{N}}]$ określają kierunek i płaszczyznę ścinania w lokalnym układzie K_C związanym z początkową orientacją sieci kryształu. Cztery początkowe orientacje sieci zostały zadane poprzez ustalenie orientacji wektorów $[\mathbf{M}]$ i $[\mathbf{N}]$, por. tab. 6.1 i (6.3), w lokalnym układzie odniesienia K_C .

Tablica 6.1: Kierunki i płaszczyzny sieci kryształu odpowiadające zadany początkowym orientacjom wektorów prostego ścinania $[\mathbf{M}]$ i $[\mathbf{N}]$ (względem układu K_C).

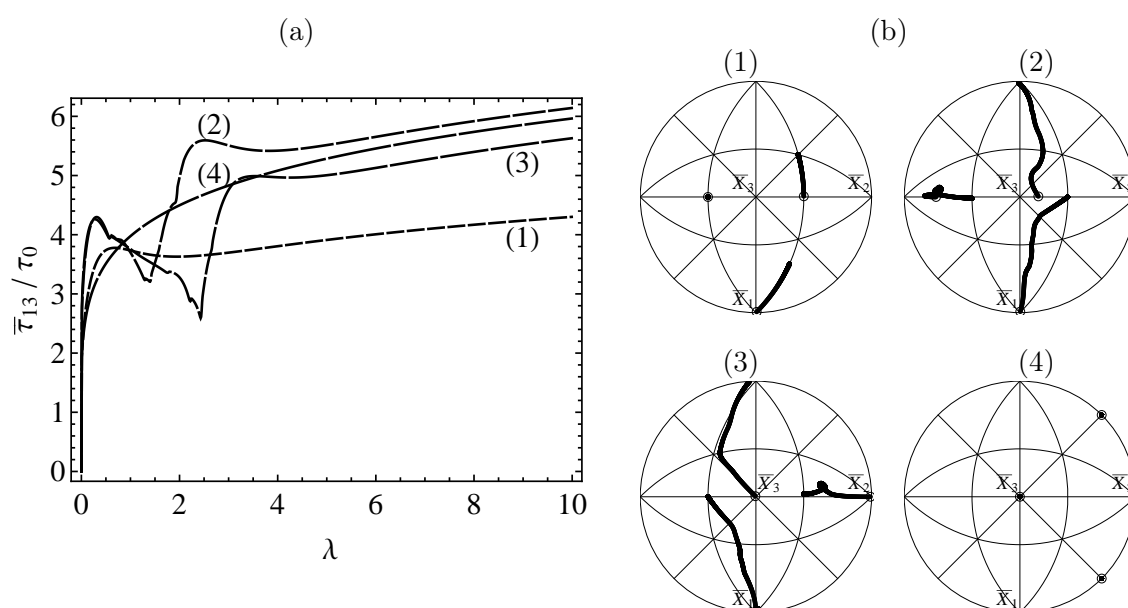
	Orientacja			
	(1)	(2)	(3)	(4)
$[\mathbf{M}]$	[100]	[100]	[100]	[110]
$[\mathbf{N}]$	(011)	(013)	(001)	(001)

Zadane wektory $[\mathbf{M}]$ i $[\mathbf{N}]$ wyznaczają ustalony kierunek i płaszczyznę prostego ścinania względem sieci kryształu. Składowe macierzy obrotu $[\mathbf{Q}^R]$ dla czterech orientacji zostały wyznaczone w postaci

$$[\mathbf{Q}^R]_{(3 \times 3)} = \{[\mathbf{M}] \quad [\mathbf{M}] \times [\mathbf{N}] / |[\mathbf{M}] \times [\mathbf{N}]| \quad [\mathbf{N}]\}. \quad (6.3)$$

Orientacja (1). Odpowiedź materiału ma regularny charakter. Po etapie potęgowego wzmocnienia występuje krótki etap osłabienia a następnie kolejny etap wzmocnienia, por. rys. 6.1(a). Charakter naprężenia wynika z aktywacji, w pierwszym kroku deformacji, dwóch współliniowych systemów $d\bar{1}$ i $b\bar{1}$ (tab. 2.1 i 2.2) o równych przyrostach

ścinania. Następnie, w drugim kroku deformacji, zostają aktywowane dodatkowe systemy $c3$ i $c\bar{2}$, które płyną wolniej. Cztery aktywne systemy podlegają wzajemnemu utajonemu wzmocnieniu. W wyniku postępującego obrotu sieci (rys. 6.1(b)), od deformacji $\lambda > 1.25$ sytuacja odwraca się i dominującą rolę w plastycznym płynięciu przejmują dwa systemy $c3$ i $c\bar{2}$, w efekcie naprężenie ścinające maleje (rys. 6.1(a)). Od deformacji około $\lambda > 4$ systemy ($c3$, $c\bar{2}$) płyną ze stałym przyrostem $\Delta\gamma^{c3} = \Delta\gamma^{c\bar{2}} = 0.00577$, co powoduje ponowny wzrost naprężenia $\bar{\tau}_{13}$. W końcowym kroku deformacji skumulowany poślizg na systemach wynosi $\gamma^{c3} = \gamma^{c\bar{2}} = 5.49$ i $\gamma^{d1} = \gamma^{b\bar{1}} = 0.68$. Pozostałe systemy nie zostały nigdy uruchomione. Sieć kryształu ulega stabilnemu obrotowi, por. rys. 6.1(a), który stopniowo zanika w trakcie postępującej deformacji (w zakresie $\lambda > 3$). W orientacji (1) nie występują przejścia między narożami plastycznymi, por. punkt 6.1.2.



Rysunek 6.1: Przebieg wartości naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}_{13}$ w trakcie prostego ścinania (a) oraz trajektorie kierunków sieci $[100]$, $[010]$ i $[001]$ względem układu globalnego (b), przy deformacji kryształu o orientacjach (1)–(4).

Orientacja (2). Proces deformacji można podzielić na dwa etapy o zasadniczo różnym charakterze (rys. 6.1(a)). Podczas pierwszego etapu deformacji przebieg naprężenia ma nieregularny charakter. W drugim etapie, dla parametru $\lambda > 2.09$ deformacja stabilizuje się, nie występują nieregularności w przebiegu $\bar{\tau}_{13}$ i pojawia się stopniowy wzrost wartości naprężenia. Widoczne nieregularności naprężenia należy wiązać z uruchamianiem i z zatrzymywaniem systemów poślizgu. Podczas pierwszego etapu deformacji występują nieregularne obroty sieci kryształu (rys. 6.1(b)) oraz wielokrotne przejścia między narożami plastycznymi, por. punkt 6.1.2. W pierwszym kroku deformacji zostaje uruchomionych pięć systemów poślizgu ($a1$, $b3$, $c3$, $d1$, $b\bar{1}$). Następuje szybki wzrost wartości naprężenia ścinającego wynikający z utajonego wzmocnienia tych pięciu systemów. Następnie, w wyniku obrotu sieci, pojawia się osłabienie geometryczne materiału oraz kolejne przejścia między narożami plastycznymi. W drugim etapie deformacji, gdy $\lambda > 2.09$, dominującą rolę w poślizgu plastycznym zaczynają odgrywać dwa systemy $b1$ i $d\bar{1}$. Gdy $\lambda > 3.31$ płynię pięć innych systemów ($a3$, $b1$, $a\bar{1}$, $b\bar{2}$, $d\bar{1}$), następnie od wartości $\lambda = 4.32$ aktywne są tylko cztery systemy ($a3$, $b1$, $a\bar{1}$, $d\bar{1}$), a gdy

$\lambda \geq 9.49$ już tylko trzy systemy poślizgu ($a\bar{3}, b1, d\bar{1}$). Do końca modelowanej deformacji dominują dwa systemy o zbliżonych wartościach przyrostów ścinania $\Delta\gamma^{b1} = 0.00873$ i $\Delta\gamma^{d\bar{1}} = 0.00853$. W końcowym kroku deformacji poślizg na systemach ($b1, d\bar{1}$) wynosi $\gamma^{b1} = 7.18$ i $\gamma^{d\bar{1}} = 6.29$, a na pozostałych ma wartości w zakresie 0.841–0.0475.

Orientacja (3). W tym przypadku można również wyróżnić dwa etapy o odmiennym charakterze odpowiedzi materiału, por. rys. 6.1(a). W pierwszym etapie, do wartości $\lambda = 3.08$, deformacja ma złożony charakter, występują liczne przejścia między narożami plastycznymi, a obrót sieci ma nieregularny charakter, por. rys. 6.1(b). Podczas drugiego etapu odpowiedź materiału ma regularny charakter. Szczegółową analizę wyników przedstawiono poniżej.

Orientacja (4). W tej szczególnej orientacji sieci, w trakcie całego procesu deformacji, występuje potęgowe wzmocnienie materiału, por. rys. 6.1(a). Aktywne są dwa współliniowe systemy $c\bar{3}$ i $d\bar{3}$, które podlegają samoumocnieniu oraz wzajemnemu utajonemu wzmocnieniu. Prawie stały przyrost ścinania na dwóch systemach wynosi $\Delta\gamma^{c\bar{3}} = \Delta\gamma^{d\bar{3}} = 0.00866$ i w końcowym kroku deformacji daje wartość zakumulowanych ścieg $\gamma^{c\bar{3}} = \gamma^{d\bar{3}} = 8.65$. Sieć kryształu nie podlega obrotom i nie występują przejścia między narożami plastycznymi, por. rys. 6.1(b).

Analiza prostego ścinania w płaszczyźnie 1-3 (Orientacja (3))

Zamieszczone tu wyniki dotyczą prostego ścinania kryształu o orientacji (3) wg tab. 6.1. Wersory określające kierunek i płaszczyznę lokalnego ścinania pokrywają się w początkowej orientacji sieci (3) z wersorami w globalnym układzie odniesienia \bar{K}_S , więc $[\mathbf{M}] = [\bar{\mathbf{M}}] \rightarrow [100]$ i $[\mathbf{N}] = [\bar{\mathbf{N}}] \rightarrow (001)$. Zadawany tensor gradientu deformacji $\mathbf{F}(\lambda)$ (6.1) posiada w globalnym układzie \bar{K}_S reprezentację $[\bar{\mathbf{F}}]$ w postaci

$$[\bar{\mathbf{F}}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \lambda \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (6.4)$$

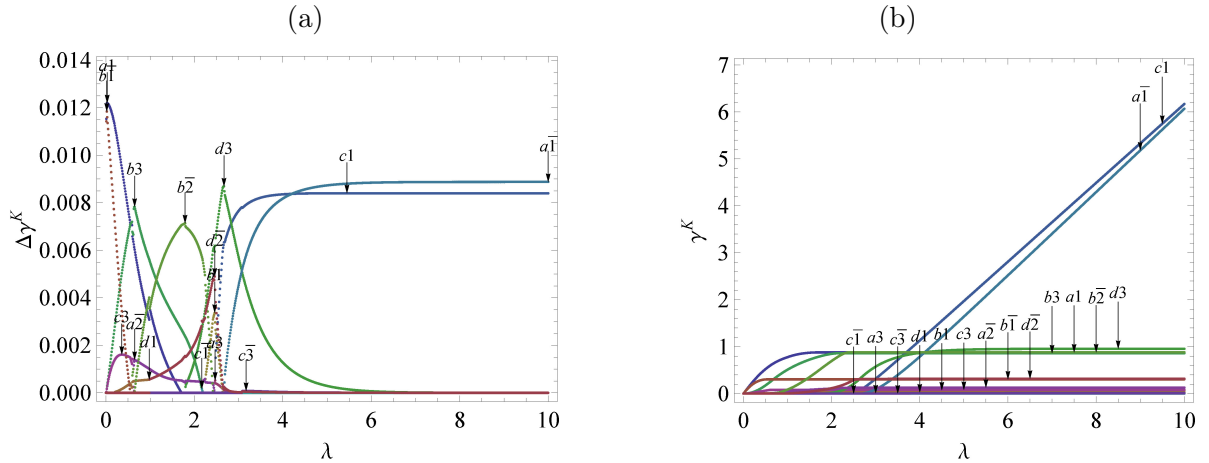
gdzie parametr obciążania $\lambda = \bar{F}_{13} = F_{13}$, ponieważ $[\bar{\mathbf{F}}] = [\mathbf{F}]$.

Odpowiedź materiału, obserwowana przez pryzmat zmieniających się naprężeń, w pierwszym etapie deformacji ma silnie nieregularny charakter, por. rys. 6.1(a) dla (3) i rys. 6.3. W kolejnym etapie obserwowane jest wyraźne ustabilizowanie odpowiedzi materiału ze stopniowym wzmocnieniem biegnącym do końca numerycznej symulacji. W celu wyjaśnienia przyczyn tych nieregularności należy przeanalizować sekwencję zmieniającego się zbioru aktywnych systemów poślizgu \mathcal{A} , por. tab. 6.2.

Systemy ($a1, b3, c3, b\bar{1}$) aktywowane w pierwszym kroku deformacji zostają odciążone podczas pierwszego etapu, w związku z tym dla $\lambda = 3.08$ aktywne są inne systemy: ($c1, d3, a\bar{1}, c\bar{3}, d\bar{2}$), por. tab. 6.2. Od punktu $\lambda = 7.13$ do końca modelowanej deformacji aktywne są systemy ($c1, d3, a\bar{1}, c\bar{3}$). W końcowym kroku deformacji przyrosty ścinania systemów ($c1, a\bar{1}$) osiągają największe wartości $\Delta\gamma^{c1} = 0.00839$, $\Delta\gamma^{a\bar{1}} = 0.00887$, natomiast przyrosty ścinania pozostałych systemów wynoszą $\Delta\gamma^{d3}$ i $\Delta\gamma^{c\bar{3}} < 10^{-6}$, por. 6.2(a). W ostatnim kroku obciążania poślizg na systemach wynosi $\gamma^{c1} = 6.16$ i $\gamma^{a\bar{1}} = 6.06$, a dla systemów ($b3, d3, a1, b\bar{2}$) są w przedziale 0.95–0.86. Poślizg pozostałej grupy systemów aktywowanych, podczas deformacji, ma wartości $\gamma < 0.3$, por. 6.2(b).

Tablica 6.2: Proste ścinanie kryształu o orientacji (3): wartości składowej gradientu deformacji $F_{13} = \lambda$, wartości odkształcenia inżynierskiego $E_{13}^{(1)}$ oraz zbiór aktywnych systemów poślizgu \mathcal{A} , na wybranych krokach obciążania, gdy zmianie ulegał zbiór \mathcal{A} .

Krok 1	$\lambda = F_{13} = 0.01$	$E_{13}^{(1)} = 0.0050$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, c3, b\bar{1}\}$
Krok 20	$\lambda = F_{13} = 0.2$	$E_{13}^{(1)} = 0.10$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, c3, d1, b\bar{1}\}$
Krok 56	$\lambda = F_{13} = 0.56$	$E_{13}^{(1)} = 0.27$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, c3, d1\}$
Krok 59	$\lambda = F_{13} = 0.59$	$E_{13}^{(1)} = 0.28$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, c3, d1, b\bar{2}\}$
Krok 63	$\lambda = F_{13} = 0.63$	$E_{13}^{(1)} = 0.30$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, c3, d1, a\bar{2}\}$
Krok 65	$\lambda = F_{13} = 0.65$	$E_{13}^{(1)} = 0.31$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, d1, a\bar{2}, b\bar{2}\}$
Krok 99	$\lambda = F_{13} = 0.99$	$E_{13}^{(1)} = 0.44$	$\mathcal{A} = \{a1, b3, a\bar{2}, b\bar{2}, d\bar{2}\}$
Krok 171	$\lambda = F_{13} = 1.71$	$E_{13}^{(1)} = 0.65$	$\mathcal{A} = \{b3, a\bar{2}, b\bar{2}, d\bar{2}\}$
Krok 180	$\lambda = F_{13} = 1.8$	$E_{13}^{(1)} = 0.67$	$\mathcal{A} = \{b3, d3, a\bar{2}, b\bar{2}, d\bar{2}\}$
Krok 217	$\lambda = F_{13} = 2.17$	$E_{13}^{(1)} = 0.74$	$\mathcal{A} = \{d3, a\bar{2}, b\bar{2}, c\bar{1}, d\bar{2}\}$
Krok 219	$\lambda = F_{13} = 2.19$	$E_{13}^{(1)} = 0.74$	$\mathcal{A} = \{d3, a\bar{2}, b\bar{2}, d\bar{2}\}$
Krok 225	$\lambda = F_{13} = 2.25$	$E_{13}^{(1)} = 0.75$	$\mathcal{A} = \{b1, d3, a\bar{2}, b\bar{2}, d\bar{2}\}$
Krok 243	$\lambda = F_{13} = 2.43$	$E_{13}^{(1)} = 0.77$	$\mathcal{A} = \{b1, d3, a\bar{2}, d\bar{2}\}$
Krok 246	$\lambda = F_{13} = 2.46$	$E_{13}^{(1)} = 0.78$	$\mathcal{A} = \{a3, b1, d3, d\bar{2}\}$
Krok 247	$\lambda = F_{13} = 2.47$	$E_{13}^{(1)} = 0.78$	$\mathcal{A} = \{a3, b1, c1, d3, d\bar{2}\}$
Krok 265	$\lambda = F_{13} = 2.65$	$E_{13}^{(1)} = 0.80$	$\mathcal{A} = \{a3, c1, d3, d\bar{2}\}$
Krok 268	$\lambda = F_{13} = 2.68$	$E_{13}^{(1)} = 0.80$	$\mathcal{A} = \{a3, c1, d3, a\bar{1}, d\bar{2}\}$
Krok 280	$\lambda = F_{13} = 2.8$	$E_{13}^{(1)} = 0.81$	$\mathcal{A} = \{c1, d3, a\bar{1}, d\bar{2}\}$
Krok 308	$\lambda = F_{13} = 3.08$	$E_{13}^{(1)} = 0.84$	$\mathcal{A} = \{c1, d3, a\bar{1}, c\bar{3}, d\bar{2}\}$
Krok 713	$\lambda = F_{13} = 7.13$	$E_{13}^{(1)} = 0.96$	$\mathcal{A} = \{c1, d3, a\bar{1}, c\bar{3}\}$

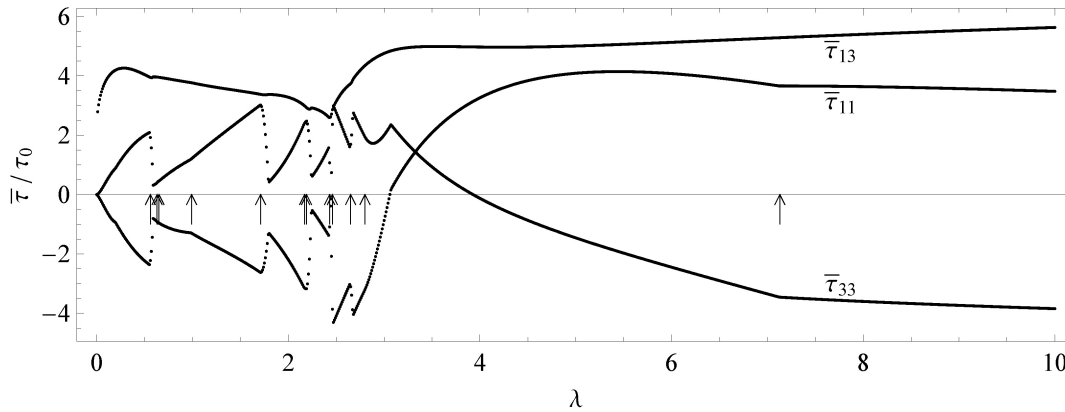


Rysunek 6.2: Wartości przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$ (a) i wartości ścinania γ^K zakumulowanego na systemach aktywnych (b).

W przypadku prostego ścinania bez wstępnego obrotu kryształu (orientacja (3)), w wyniku wielokrotnej symetrii, możliwe są rozwiązania, gdzie aktywowany jest równoważny (pod względem minimum energii przyrostowej) zbiór systemów poślizgu. Istnieją również rozwiązania o odmiennym przebiegu, nie dające minimum energii przyrostowej.

Przebieg składowych naprężenia $\bar{\tau}_{13}$, $\bar{\tau}_{11}$, $\bar{\tau}_{33}$ wykazuje nieregularności w postaci na-

głych spadków i stopniowych wzrostów (bezwzględnych) wartości, por. rys. 6.3. Można zauważyć, że po etapie silnego wzmocnienia następuje powolne zmniejszanie naprężenia $\bar{\tau}_{13}$ zakończone pierwszą nieregularnością, gdzie widoczny jest spadek wartości bezwzględnych $\bar{\tau}_{11}$ i $\bar{\tau}_{33}$. Pierwsza obserwowana nieregularność ma początek przy $\lambda = 0.56$, w chwili odciążenia systemu $b\bar{1}$ i koniec przy $\lambda = 0.59$, gdy system $b\bar{2}$ zaczyna płynąć. Pozostałe nieregularności wykresu naprężenia mają podobny przebieg. Można zauważyć, że występujące nieregularności w naprężeniach powstają w chwili zatrzymania jednego z płynących systemów, por. tab. 6.2. Punkty odciążenia systemów zostały oznaczone dwunastoma pionowymi strzałkami na rysunku 6.3, identycznie na trajektoriach kierunków sieci (rys. 6.5(a)) oraz na przebiegu zmian długości wektora wiru sieci (rys. 6.5(b)). Poniżej, w punkcie 6.1.2, zamieszczono wyjaśnienie przyczyn powstawania nieregularności będących wynikiem przejść między narożami powierzchni plastyczności, spowodowanych uwzględnieniem obrotów sieci kryształu.

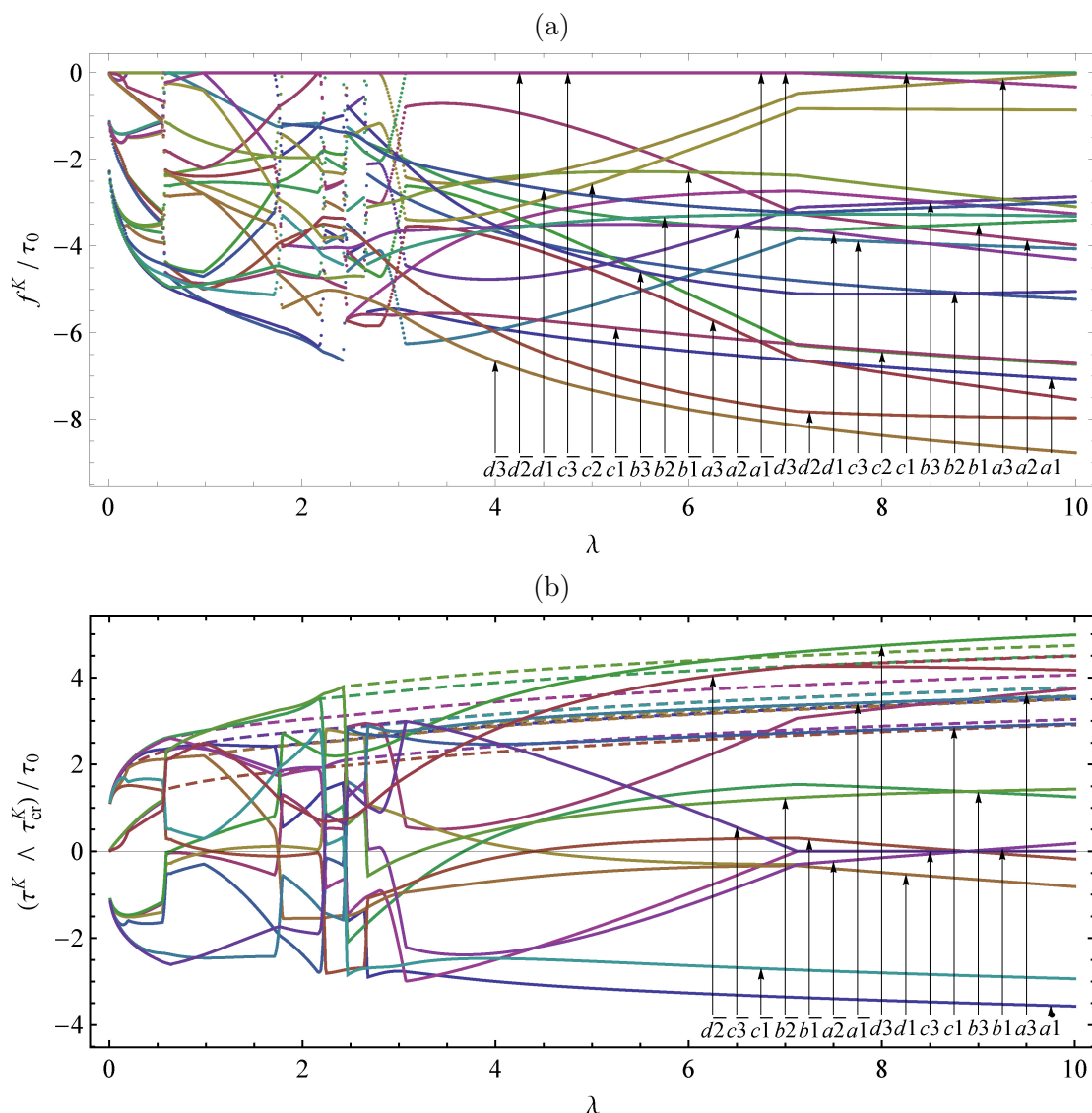


Rysunek 6.3: Przebieg wartości naprężenia Kirchhoffa τ : składowe $\bar{\tau}_{13}$, $\bar{\tau}_{11}$ i $\bar{\tau}_{33}$ w układzie globalnym.

Na wykresach funkcji plastyczności f^K występują analogiczne nieregularności dla wszystkich systemów poślizgu, por. rys. 6.4(a). Widoczna staje się relacja między uruchamianiem i zatrzymywaniem systemów, nieregularnościami na wykresach naprężenia oraz zmianami funkcji, które tworzą naroże plastyczne.

Nałożenie dwóch wykresów, mianowicie wartości wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K i odpowiadających temu naprężeniu (większych lub równych) wartości krytycznych τ_{cr}^K daje obraz działania, stosowanej tutaj, selektywnej symetryzacji macierzy modułów interakcji. Efekty geometryczne wynikające z obrotów sieci kryształu powodują, w trakcie deformacji, dodatkowe (ponad zadanym potęgowym) wzmocnienie lub osłabianie poszczególnych systemów. Można zauważyć, że z chwilą gdy dowolny system przestaje płynąć, przebieg wartości krytycznych naprężenia ścinającego zatrzymanego systemu przyjmuje potęgowy charakter, wynikający z założonych fizycznych modułów wzmocnienia \mathcal{K}^{KL} , por. rys. 6.4(b).

Sieć kryształu podlega dużym obrotom obserwowanym zwłaszcza w pierwszym etapie deformacji, kiedy poślizgi nie są ustabilizowane, a na przebiegu naprężenia obserwowane są nieregularności. W drugim etapie dominującą rolę w plastycznym płynięciu przejmują dwa systemy ($c1, a\bar{1}$), wówczas obroty sieci stopniowo zanikają, por. rys. 6.5. Warto zauważyć, że obserwowane trajektorie kierunków sieci kryształu względem układu globalnego \bar{K}_S nie wykazują nieciągłości. W końcowym kroku obciążania, na sku-



Rysunek 6.4: Przebieg wartości funkcji plastyczności f^K wszystkich systemów (a) oraz wartości wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K (linie ciągłe) i wartości krytycznych τ_{cr}^K (linie przerywane) dla systemów aktywowanych podczas deformacji (b).

tek obrotu powstałego w trakcie całego procesu deformacji, trzy kierunki sieci [100], [010], [001], przyjmują orientacje wyznaczone przez wersory o składowych, odpowiednio, $\{0.00 \ -0.706 \ 0.707\}$, $\{-0.039 \ 0.706 \ 0.706\}$, $\{-1.00 \ -0.027 \ -0.0287\}$, względem układu \bar{K}_S , por. rys. 6.5(a).

Analiza zmiany długości wektora wiru sieci \mathbf{w}^* umożliwia ocenę prędkości obrotów sieci kryształu, por. rys. 6.5(b). Wektor wiru \mathbf{w} , utożsamiany z wektorem prędkości kątowej ciała w ruchu sztywnym, można zapisać w postaci

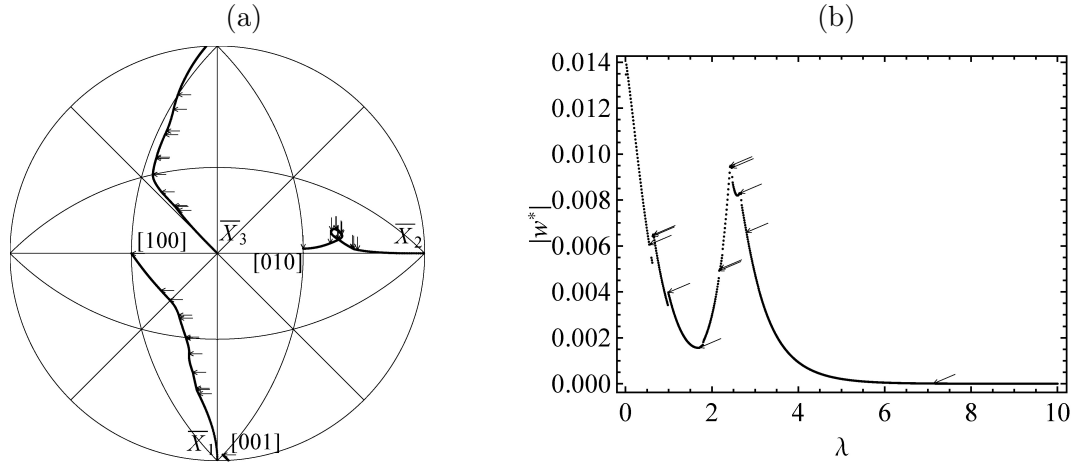
$$\mathbf{w} = \frac{1}{2} \text{tr}_{(1,2)}(\boldsymbol{\epsilon}), \quad (6.5)$$

gdzie tensor $\boldsymbol{\epsilon} = \epsilon_{kji} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_i$ posiada składowe ϵ_{kji} stanowiące (absolutnie antysymetryczny) symbol permutacyjny Levi-Civité. Działanie $\text{tr}_{(1,2)}(\)$ oznacza zwięzienie tensora po parze składowych 1 i 2. Na każdym kroku przyrostowej deformacji wyznaczany jest

przyrost wektora wiru $\Delta t \mathbf{w}^*$ sieci kryształu, w postaci

$$\Delta t \mathbf{w}^* \sim \Delta t w_i^* = -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \Delta t \omega_{jk}^*. \quad (6.6)$$

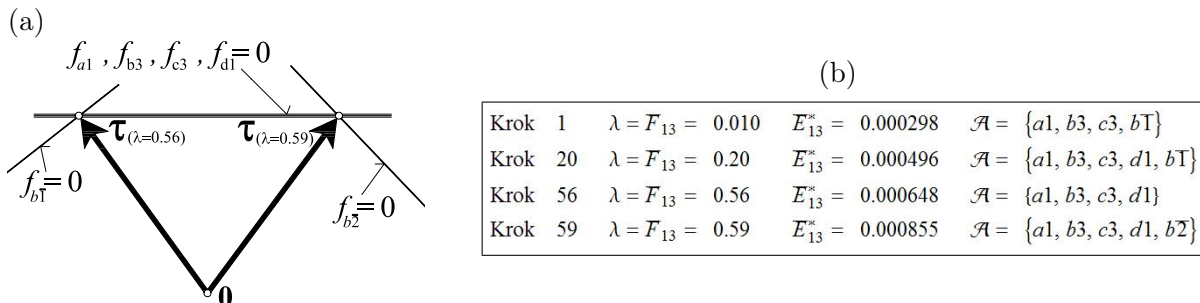
Wartości składowych $\Delta t w_i^*$ przyrostu chwilowej prędkości obrotowej sieci (2.13) wyznaczone są w postaci $\Delta t \omega^* = \text{skew}((\mathbf{F}_n^* - \mathbf{F}_{n-1}^*) \bar{\mathbf{F}}_n^*)$.



Rysunek 6.5: Trajektorie trzech kierunków sieci względem układu globalnego \bar{K}_S (a) oraz zmiana długości wektora wiru sieci kryształu $|\mathbf{w}^*|$ (b). Strzałki wskazują punkty unieruchomienia systemów.

6.1.2 Analiza przejścia między narożami powierzchni plastyczności

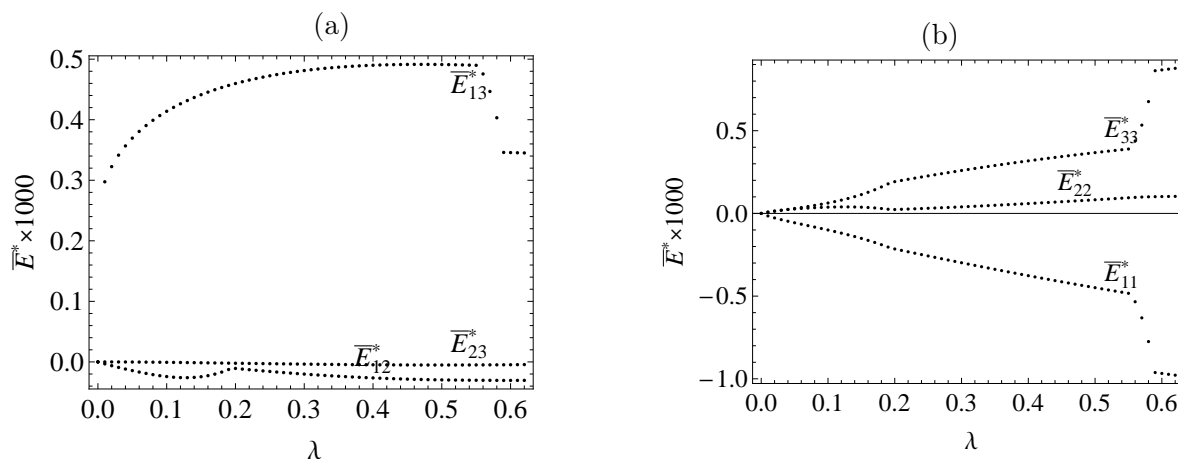
Analiza nieregularności, obserwowanych na wykresach składowych naprężenia (6.3), dotyczy deformacji materiału w procesie prostego ścinania w płaszczyźnie 1-3 globalnego układu \bar{K}_S . Proces deformacji jest modelowany przy pełnych więzach kinematycznych i bez wstępnego obrotu sieci kryształu, jak w przypadku orientacji (3) analizowanej w punkcie 6.1.1. W przypadku braku wstępnego obrotu sieci macierz $[\mathbf{Q}^R] = [\mathbf{1}]$, a wielkości obserwowane względem układu globalnego i lokalnego są nierozróżnialne.



Rysunek 6.6: Schemat dwóch naroży plastycznych (a) oraz obliczona sekwencja systemów aktywnych (b).

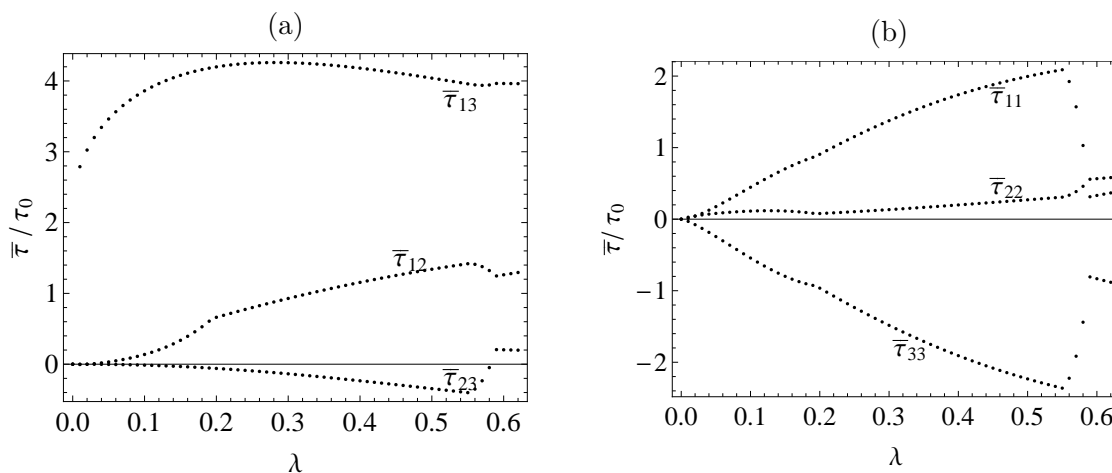
Poniższa analiza jest prowadzona do chwili, gdy parametr obciążania $\lambda = \bar{F}_{13}$ osiągnie wartość 0.62, co odpowiada odkształceniu Greena (2.22) o składowej $\bar{E}_{13}^* = 0.31$.

Przebieg procesu deformacji jest modelowany w 62 krokach podstawowej pętli obciążania. Przyrost parametru sterowania $\Delta\lambda = 10^{-2}$ jest stały w każdym kroku deformacji.



Rysunek 6.7: Przebieg wartości sprężystego odkształcenia Greena \mathbf{E}^* : składowe \bar{E}_{13}^* , \bar{E}_{12}^* , \bar{E}_{23}^* (a) oraz składowe \bar{E}_{11}^* , \bar{E}_{22}^* , \bar{E}_{33}^* (b), względem układu globalnego. Parametr obciążania $\lambda = \bar{F}_{13}$.

Na etapie deformacji od wartości $\lambda = 0.56$ do $\lambda = 0.59$ występują wyraźne nieregularności widoczne na wykresach odkształcenia Greena \mathbf{E}^* (rys. 6.7) oraz wykresach naprężenia Kirchhoffa τ (rys. 6.8). Nieregularności należy wiązać z procesem przejścia stanu naprężenia między narożami powierzchni plastyczności. Do chwili deformacji o wartości $\bar{F}_{13} < 0.56$ aktywnych jest pięć systemów poślizgu ($a1, b3, c3, d1, b\bar{1}$) (rys. 6.6) i w narożu plastycznym przecina się pięć powierzchni plastyczności. Od chwili odciążenia systemu $b1$, przy deformacji $\bar{F}_{13} = 0.56$, rozpoczyna się etap przejścia do kolejnego naroża plastycznego. Przy deformacji $\bar{F}_{13} = 0.59$ stan naprężenia wypada już w kolejnym narożu, w którym przecina się ponownie pięć powierzchni plastyczności $f^{K \in \mathcal{A}}$, gdzie $\mathcal{A} = (a1, b3, c3, d1, b\bar{2})$.



Rysunek 6.8: Przebieg wartości naprężenia Kirchhoffa τ : składowe $\bar{\tau}_{13}$, $\bar{\tau}_{12}$, $\bar{\tau}_{23}$ (a) oraz składowe $\bar{\tau}_{11}$, $\bar{\tau}_{22}$, $\bar{\tau}_{33}$ (b), względem układu globalnego.

Przyrost odkształcenia całkowitego $\Delta t \mathbf{d}$ oraz odkształcenia plastycznego $\Delta t \mathbf{d}^P$ na długości kroku deformacji obliczany, jest zgodnie z regułą trapezów, wg wzoru

$$\Delta t \mathbf{d} = \text{sym}((\mathbf{F}_n - \mathbf{F}_{n-1}) \cdot (\mathbf{F}_n + \mathbf{F}_{n-1})^{-1}), \quad \text{czyli} \quad \Delta t \mathbf{d} \sim \frac{\Delta t}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

gdzie składowe gradientu deformacji \mathbf{F} w punktach (n) i $(n-1)$ wynikają z ustalonego sterowania (6.4). Obliczany wg wzoru (6.7) przyrost odkształcenia $\Delta t \mathbf{d}$ ma stałą wartość na całej długości kroku deformacji, w odróżnieniu od zmieniających się wartości przyrostu odkształcenia plastycznego $\Delta t \mathbf{d}^P$ oraz sprężystego $\Delta t \mathbf{d}^E$. Wartości składowych prędkości deformacji plastycznej (6.9), na chwilę przed $\mathbf{d}_{n=55}^P$ i po przejściu do nowego naroża plastycznego $\mathbf{d}_{n=60}^P$, są bliskie wartościom prędkości odkształcenia całkowitego \mathbf{d} (6.7). Wartość odkształcenia \mathbf{d} wynika z zadanego gradientu deformacji $\mathbf{F}(\lambda)$ (6.4). Natomiast na etapie przejściowym między narożami plastycznymi, np. dla przyrostowego kroku oznaczonego indeksem $n = 59$, zmianie ulega plastyczna prędkość odkształcenia, a zwłaszcza składowe 11 i 33, por. rys. 6.9.

$$\mathbf{d}_{n=55}^P = \begin{pmatrix} 0.0005377 & -0.00002614 & 0.4996 \\ -0.00002614 & -0.0002744 & -0.00005847 \\ 0.4996 & -0.00005847 & -0.0002625 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{d}_{n=59}^P = \begin{pmatrix} 0.01713 & -0.001114 & 0.4909 \\ -0.001114 & -0.002882 & -0.006787 \\ 0.4909 & -0.006787 & -0.01424 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{d}_{n=60}^P = \begin{pmatrix} 0.0004073 & -0.00007137 & 0.4997 \\ -0.00007137 & -0.0001303 & -0.0001432 \\ 0.4997 & -0.0001432 & -0.0002764 \end{pmatrix}$$

Rysunek 6.9: Wartości składowych tensora plastycznej prędkości odkształcenia przed, w trakcie i po przejściu do nowego naroża plastycznego.

W celu ułatwienia analizy przejścia między narożami wprowadzono kąt α , który jest rozpięty między tensorami prędkości odkształcenia całkowitego \mathbf{d} i plastycznego \mathbf{d}^P , por. (2.13). Na końcu każdego kroku przyrostowej deformacji obliczany jest cosinus kąta α w postaci

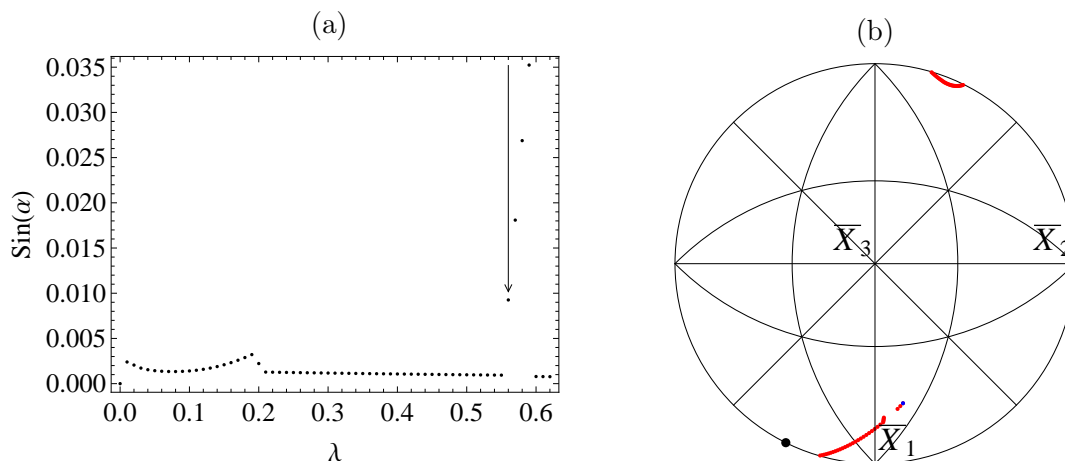
$$\cos \alpha = \frac{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}^P}{\|\mathbf{d}\| \|\mathbf{d}^P\|}, \quad \text{gdzie} \quad \|\mathbf{d}\| = \sqrt{\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}}. \quad (6.8)$$

Przebieg wartości $\sin(\alpha)$ podczas procesu deformacji wskazuje na podobne zorientowanie tensora całkowitej i plastycznej prędkości odkształcenia. Tylko na etapie przeskoku między narożami plastycznymi występuje różnica w orientacji tensorów \mathbf{d} i \mathbf{d}^P , por. rys. 6.10.

Obroty materiału generowane plastyczną deformacją są tu określane przez badanie zmian orientacji wektora wiru \mathbf{w}^P (2.11). Składowe wektora wiru w_i^P plastycznej deformacji materiału wyznaczone wg wzoru (6.5) można przedstawić w postaci

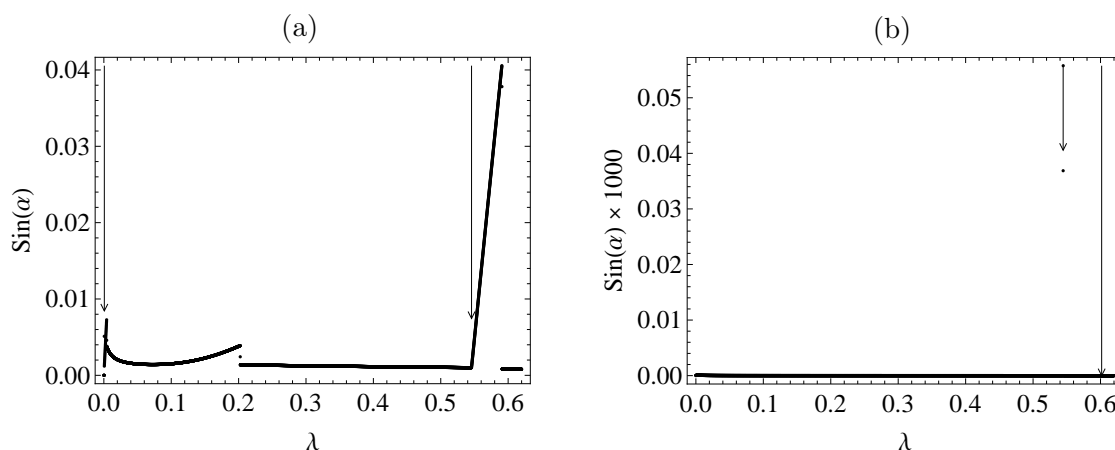
$$w_i^P = -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \omega_{jk}^P. \quad (6.9)$$

Podczas procesu deformacji materiału wektor wiru \mathbf{w}^P zmienia orientację. Na etapie przejścia stanu naprężenia między dwoma analizowanym narożami plastycznymi (6.6(a)), orientacja wektora \mathbf{w}^P ulega skokowej zmianie, por. rys. 6.10(a).



Rysunek 6.10: Wykres wartości sinusa kąta między \mathbf{d} i \mathbf{d}^P (a) oraz ślad kierunku wektora wiru \mathbf{w}^P plastycznej deformacji materiału względem układu globalnego (b).

Nieregularności, widoczne na przebiegu wartości naprężenia, pozostają zachowane w przypadku skrócenia przyrostu kroku deformacji do $\Delta\lambda = 10^{-4}$, por. rys. 6.11(a). W przypadku analizy prowadzonej z krótszym krokiem etap przejścia między systemami zaczyna się dla deformacji $\bar{F}_{13} = 0.5457$, a kończy gdy $\bar{F}_{13} = 0.5908$. Etap przejścia nie zależy w istotny sposób od długości kroku, nie jest to więc efekt czysto numeryczny por. rys. 6.11(a) i rys. 6.10(a). W przypadku dodatkowego zwiększenia sztywności sieci (gdy $\Delta\lambda = 10^{-4}$), poprzez zwiększenie wartości modułów sprężystości $(C_{11}^*, C_{12}^*, C_{44}^*) \times 10^5$, etap przejścia między narożami trwa krócej (od wartości $\bar{F}_{13} = 0.5446$ do $\bar{F}_{13} = 0.5447$) i przypomina nagły przeskok, rys. 6.11(b).



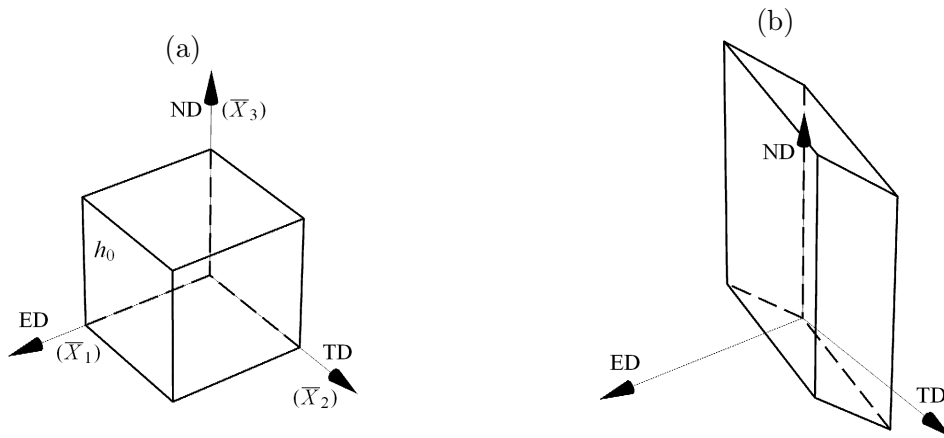
Rysunek 6.11: Wykres wartości sinusa kąta między \mathbf{d} i \mathbf{d}^P przy długości kroku $\Delta\lambda = 10^{-4}$: moduły sprężystości $(C_{11}^*, C_{12}^*, C_{44}^*)$ (a) oraz moduły $(C_{11}^*, C_{12}^*, C_{44}^*) \times 10^5$ (b).

Podczas procesu deformacji sieć kryształu oraz powierzchnie plastyczności podlegają obrotom, które mogą powodować odciążenia powierzchni plastyczności lub przejścia między narożami plastycznymi. Analizując przebiegu zmian wartości $\text{sin}(\alpha)$ można zauważyć, że etap przejścia między narożami zaczyna się w chwili odciążenia jednej z powierzchni tworzących naroże plastyczne, por. punkty oznaczone pionowymi strzałkami na rysunkach 6.10(a) i 6.11. Odciążenie powierzchni plastyczności powoduje unieru-

chomienie aktywnego systemu poślizgu. Poślizg na pozostałych aktywnych systemach, nie realizuje deformacji zadawanej przez całkowity gradient \mathbf{F} , gdy $\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{0}$. W trakcie przejścia między narożami powierzchni plastyczności tensor \mathbf{d}^P zmienia orientację, która dotychczas pokrywała się z orientacją \mathbf{d} , więc występuje dostosowanie sprężyste. Tensor plastycznej prędkości odkształcenia \mathbf{d}^P powraca do orientacji wyznaczonej przez tensor \mathbf{d} w chwili, gdy stan naprężenia wejdzie w kolejne naroże plastyczne utworzone z przecięcia pięciu powierzchni plastyczności. Poślizg na pięciu aktywnych systemach realizuje, z ustaloną numeryczną dokładnością, zadany schemat deformacji materiału.

6.1.3 Częściowa kontrola kinematyczna. Jednoosiowe rozciąganie monokryształu

Niniejszy rozdział zawiera wybrane wyniki numerycznego modelowania jednoosiowego rozciągania, przedstawione tu jako przykład zastosowania sterowania przy częściowej kontroli kinematycznej, por. punkt 4.3.4. Szerszy zestaw wyników oraz ich porównanie z eksperymentem zamieszczono w punkcie 6.1.4. Przykładowe wyniki przedstawione



Rysunek 6.12: Konfiguracja przed (a) i po (b) procesie jednoosiowego rozciągania.

na rysunkach 6.14, 6.15, 6.16 uzyskano przy użyciu potęgowego prawa wzmocnienia (2.64) i fizycznych modułów (2.58) z pojedynczym parametrem q . Zastosowano metodę selektywnej symetryzacji (3.13) z parametrem o wartości $r = \frac{1}{2}$. Wartości modułów sprężystości i plastyczności zostały przyjęte zgodnie z wartościami podanymi w analizie prostego ścinania, por. punkt 6.1.1.

Modelowana deformacja kryształu jest sterowana kinematycznie względem globalnego układu \bar{K}_S przy użyciu macierzy $[\bar{\mathbf{F}}]$, z parametrem λ zadawanym na kierunku rozciągania

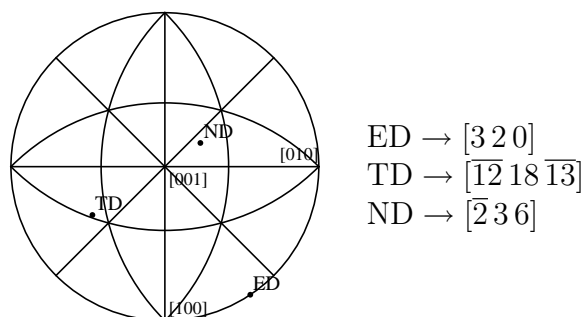
$$[\bar{\mathbf{F}}] = \begin{bmatrix} \tilde{\tilde{F}}_{11} & 0 & 0 \\ \tilde{\tilde{F}}_{21} & \tilde{\tilde{F}}_{22} & 0 \\ \tilde{\tilde{F}}_{31} & \tilde{\tilde{F}}_{32} & \lambda \end{bmatrix}, \quad [\bar{\mathbf{S}}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tilde{\tilde{S}}_{33} \end{bmatrix}, \quad (6.10)$$

gdzie poszukiwane naprężenie $[\bar{\mathbf{S}}]$ zawiera nieznaną składową $\tilde{\tilde{S}}_{33}$, podobnie jak naprężenie Kirchhoffa $[\bar{\boldsymbol{\tau}}]$ (i Cauchy'ego). Nakładana na materiał częściowa kontrola kinematyczna uwzględnia zwięźanie próbki w przekroju prostopadłym do kierunku rozciągania oraz ścinanie w trzech ortogonalnych płaszczyznach (1-3, 2-3, 1-2), por. rys.6.12.

Początkowa orientacja sieci kryształu (oznaczona symbolem $\bar{2}36$) względem układu \bar{K}_S jest wyznaczona przy użyciu macierzy obrotu $[\mathbf{Q}^R]$ (5.15) i zadanych wartości kątów Eulera $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2) = (1, -\frac{31}{180}, 1 - \frac{33.7}{180})\pi$. Trzy kierunki próbki, współliniowe z osiami $\{\bar{X}_j\}$ układu globalnego \bar{K}_S o ortonormalnej bazie $\{\bar{\mathbf{e}}_j\}$, oznaczono jako ED= $\bar{\mathbf{e}}_1$, TD= $\bar{\mathbf{e}}_2$, ND= $\bar{\mathbf{e}}_3$. Kierunek ND oznacza oś rozciągania. Przy użyciu macierzy obrotu można obliczyć składowe kierunków próbki (ED, TD, ND)

$$\begin{aligned} \text{ED} &: [\mathbf{Q}^R] \{1 \ 0 \ 0\}^T = \{0.832 \ 0.555 \ 0.0\} \\ \text{TD} &: [\mathbf{Q}^R] \{0 \ 1 \ 0\}^T = \{-0.476 \ 0.713 \ -0.515\}, \\ \text{ND} &: [\mathbf{Q}^R] \{0 \ 0 \ 1\}^T = \{-0.286 \ 0.428 \ 0.857\} \end{aligned} \quad (6.11)$$

w bazie $\{\mathbf{e}_i\}$ związanej z początkową orientacją sieci kryształu. Obliczona powyżej początkowa orientacja wektorów (ED, TD, ND) obserwowana względem sieci kryształu ([100], [010], [001]) odpowiada trzem kierunkom krystalograficznym, por. rys. 6.13.



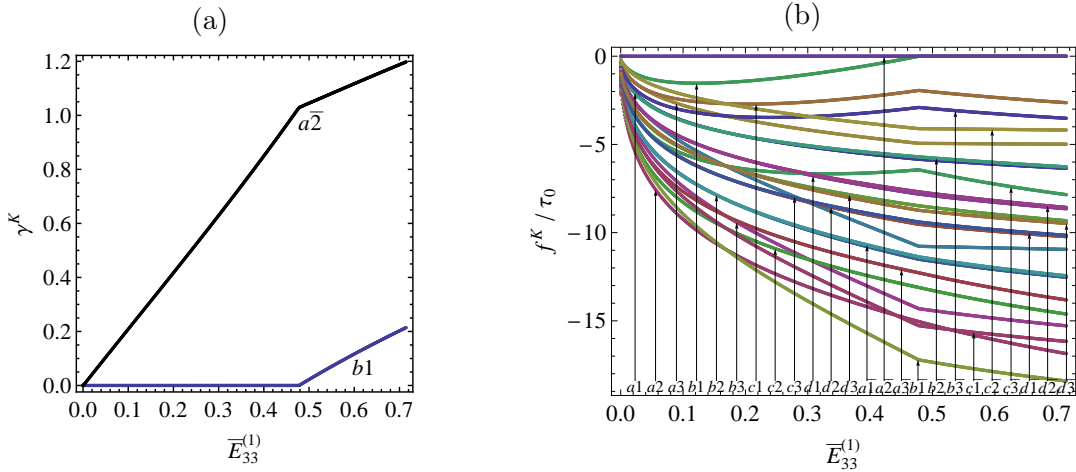
Rysunek 6.13: Początkowa orientacja kierunków próbki (ED, TD, ND) obserwowana względem sieci kryształu.

W początkowej orientacji sieci, oś rozciągania ND wypada wewnątrz trójkąta podstawowego równoległe do kierunku $[\bar{2}36]$, por. rys 2.3(b), więc jako pierwotny został uruchomiony pojedynczy system $a\bar{2}$, por. rys 2.3(a).

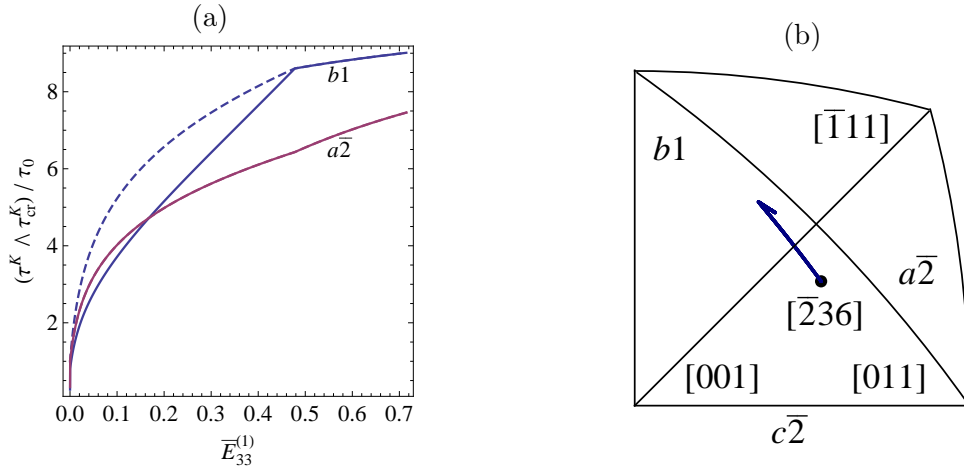
Zastosowana tu minimalizacja energii przyrostowej wykorzystuje algorytm metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a (podrozdział 5.2). W celu przyspieszenia procesu obliczeń, algorytm lagrange'owski (5.4) umożliwi rozwiązywanie wprost algebraicznego układu równań, za pomocą funkcji `LinearSolve` programu Mathematica. W przypadku gdy aktywny jest jeden pierwotny system poślizgu, spełnienie warunków aktywacji (5.3) wymaga 2 lub 3 iteracji w korygującym etapie EkP. Na kroku obciążania, gdzie dwa systemy są jednocześnie aktywne, potrzebna liczba iteracji etapu EkP jest zwiększana do ośmiu.

W każdym kroku obciążania obliczane są wartości dodatnich przyrostów ścinania $\Delta\gamma^K$ na systemach aktywnych. Zsumowane ścięcie na systemie K , obliczane w postaci $\gamma_{n+1}^K = \gamma_n^K + \Delta\gamma^K$, przyjmuje niezerowe dodatnie wartości dla aktywowanych w trakcie procesu deformacji systemów, por. rys. 6.14(a). Przy odkształceniu $\bar{E}_{33}^{(1)} = 0.0004$ uruchamiany jest ujemny system poślizgu $a\bar{2}$, więc funkcja plastyczności $f^{a\bar{2}}$ przyjmuje wartości zerowe, por. rys. 6.14(b). Narastający obrót sieci kryształu (rys. 6.15(b)) powoduje, że przy odkształceniu o wartości $\bar{E}_{33}^{(1)} = 0.48$ zostaje uruchomiony system wtórny $b1$, więc funkcja plastyczności f^{b1} osiąga zerowe wartości, por. rys. 6.14(b).

Gdy oś rozciągania ND znajdzie się na krystalograficznej linii symetrii $[001]-[\bar{1}11]$, przy odkształceniu $\bar{E}_{33}^{(1)} = 0.17$, wypadkowe naprężenia Schmid'a są sobie równe $\tau^{a\bar{2}} =$



Rysunek 6.14: Orientacja $\bar{2}36$: wartości ścinania γ^K zakumulowanego na dwóch systemach aktywnych (a) i wartości wszystkich funkcji plastyczności f^K (b).

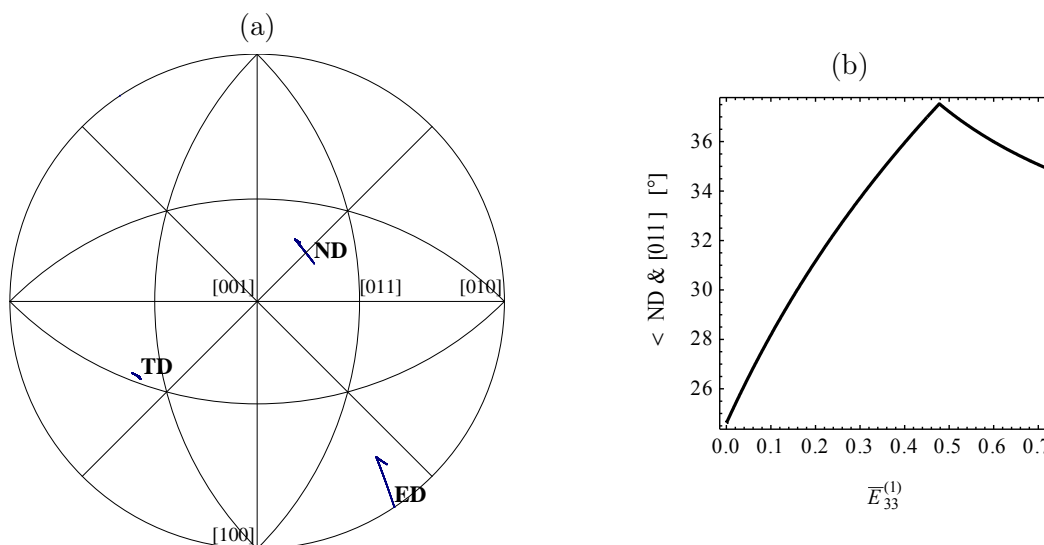


Rysunek 6.15: Orientacja $\bar{2}36$: zmiana wartości naprężenia wypadkowego τ^K (linia ciągła) i krytycznego τ_{cr}^K dwóch systemów aktywnych $a\bar{2}$ i $b1$ (linia przerywana) (a) oraz zmiana położenia osi ND \rightarrow $[236]$ widoczna na części rzutu stereograficznego (b)

τ^{b1} , por. rys. 6.15(a). Po przekroczeniu linii symetrii najbardziej obciążonym systemem poślizgu staje się $b1$. Utajone wzmocnienie $q = 1.4$ powoduje, że wartości krytycznego wypadkowego naprężenia ścinającego τ_{cr}^{b1} systemu $b1$ oraz pozostałych systemów są większe od wartości $\tau_{cr}^{a\bar{2}}$ systemu $a\bar{2}$. W punkcie $\bar{E}_{33}^{(1)} = 0.48$ następuje koniec etapu pojedynczego poślizgu, ponieważ aktualna wartość wypadkowego naprężenia Schmid'a systemu $a\bar{2}$ osiąga wartość krytyczną, wówczas funkcja plastyczności $f^{b1} = \tau^{b1} - \tau_{cr}^{b1} = 0$.

W procesie rozciągania kryształu następuje stopniowy obrót sieci krystalograficznej, por. rys. 6.16. Znajac dla każdego kroku obciążania (n) wartość sprężystej części gradientu deformacji \mathbf{F}^* można obliczyć aktualne położenie kierunków próbki (ED, ND, TD) względem sieci krystalograficznej. Gdy aktywowany zostaje drugi system poślizgu kierunek obrotu zmienia się, tzn. obrót sieci przybliży oś ND do linii symetrii $[001]$ - $[\bar{1}11]$.

Wartość kąta między początkową orientacją osi rozciągania ND a kierunkiem $[011]$ wynosi 24.62° (rys. 6.16(b)). Wraz z wydłużaniem próbki sieć kryształu ulega stopniowo narastającemu obrotowi. Ślad osi ND dochodzi do linii symetrii (przy kącie



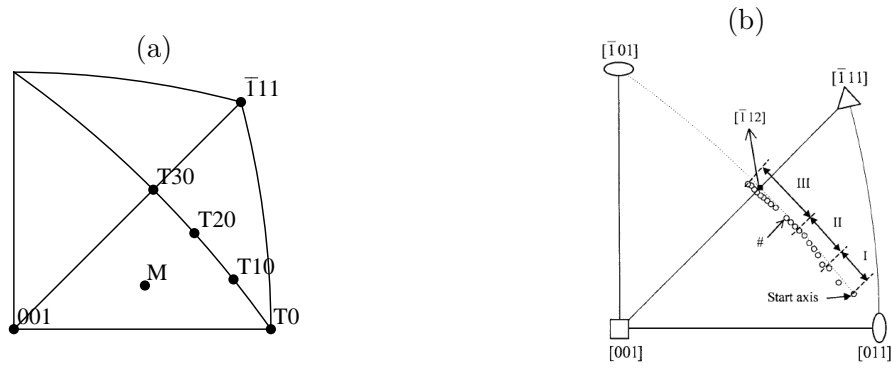
Rysunek 6.16: Orientacja $\bar{2}36$: zmiana orientacji kierunków (ED, TD, ND) względem kierunków sieci oraz zmiana wartości kąta między osią ND i kierunkiem [011].

30.45°), a następnie przekracza tą linię z powodu wprowadzonego wzmocnienia utajonego (rys. 6.15(a)). Na końcu etapu „przestrzelenia” linii symetrii, kąt między osią ND a kierunkiem [011] wynosi 37.88°. Wówczas aktywowany zostaje wtórny system $b2$, a sieć krystalograficzna rozpoczyna obrót w kierunku przeciwnym, więc oś ND zbliża się do linii symetrii.

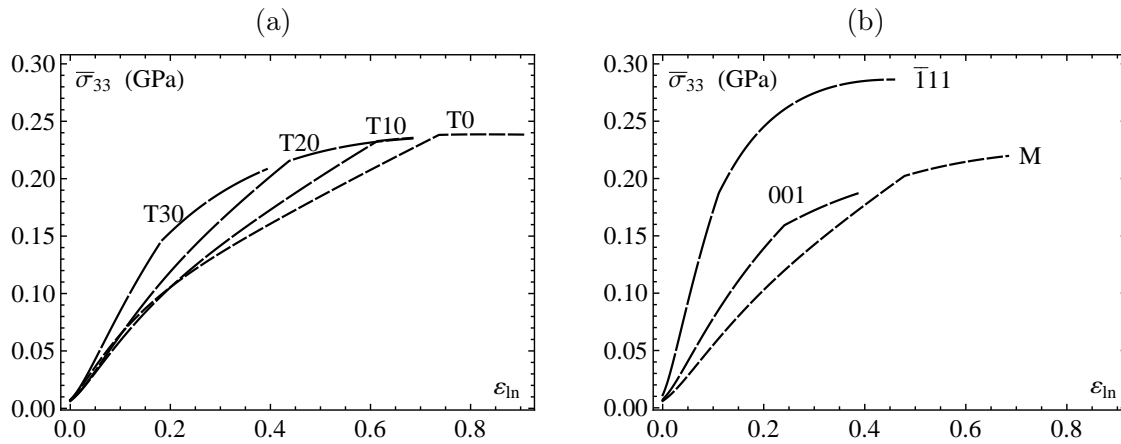
6.1.4 Jednoosiowe rozciąganie monokryształu - porównanie z eksperymentem

Modelowanie procesu jednoosiowego rozciągania monokryształów miedzi przeprowadzono dla wybranych orientacji sieci, oznaczonych jako M, T0, T10, T20, T30, 001, $\bar{1}11$, por. rys. 6.17. Wyniki numerycznej symulacji (rys. 6.18) zostały porównane z eksperymentalnymi wynikami rozciągania dostępnymi dla orientacji M, T10, T20, T30, i 100 wg pracy (Szczurba, 2001) i (Basiński et al., 1997). Dwie z pośród powyżej wymienionych, 100 i $\bar{1}11$, to orientacje o wysokiej symetrii. Wyniki modelowania rozciągania przy orientacjach o wysokiej symetrii przedstawiono w punkcie 6.1.5.

Symulacje jednoosiowego rozciągania zostały przeprowadzone przy użyciu selektywnej symetryzacji (3.13) z parametrem $r = 1/2$. Moduły sprężystości przyjęto zgodnie z modelowanym powyżej prostym ścinaniem (punkt 6.1.1). Pozostałe wartości przyjęto tak, aby otrzymana krzywa naprężenia na kierunku rozciągania odpowiadała obserwowanej eksperymentalnie krzywej w przypadku orientacji T10, por. rys. 6.19. Początkowa wartość granicy plastyczności wynosi $\tau_0 = 3$ MPa dla wszystkich systemów poślizgu. Macierz fizycznych modułów wzmocnienia przyjęto w klasycznej postaci tzw. prostego prawa wzmocnienia utajonego (2.58). Współczynnik wzmocnienia utajonego (identyczny dla wszystkich systemów nieaktywnych) ma wartość $q = 1.26$ dobraną tak, aby koniec etapu płynięcia pojedynczego systemu pierwotnego pokrywał się z wynikami eksperymentalnymi dla orientacji T10. Przyjęta funkcja określająca współczynnik



Rysunek 6.17: Początkowe orientacje osi rozciągania ND = (M, T0, T10, T20, T30, 001, $\bar{1}11$) względem sieci kryształu, widoczne na części rzutu stereograficznego (a) oraz pomierzony eksperymentalnie obrót sieci kryształu Cu wg (Kim & Koo, 2001) (b).



Rysunek 6.18: Wyniki symulacji numerycznej jednoosiowego rozciągania: wykresy naprężenie-odkształcenie dla orientacji T0–T30 (a) oraz orientacji M, 001, $\bar{1}11$ (b).

samomocnienia $h(\gamma)$ ma postaci (odmienną od tej przyjętej w punkcie 6.1.3)

$$h(\gamma) = \left((h_0 - h_s(\gamma)) \operatorname{sech}^2 \left(\frac{(h_0 - h_s(\gamma)) \gamma}{\tau_I - \tau_0} \right) + h_s(\gamma) \right) \left(1 + \tanh \left(\frac{\gamma}{\gamma_0} \right) \right). \quad (6.12)$$

Moduł wzmocnienia $h_s(\gamma) = h_{sIII} \exp(-2(\gamma - \gamma_{sIII})^2)$ zależy od wartości całkowitego zakumulowanego poślizgu plastycznego γ (2.59). Stałe w przyjętym powyżej opisie wzmocnienia to $h_0 = 70$ MPa, $\tau_I = 35$ MPa, $\gamma_0 = 0.069$, $\gamma_{sIII} = 0.85$, $h_{sIII} = 8.5$ MPa.

Początkowa wartość przyrostu parametru obciążania $\Delta\lambda = 10^{-4}$ zostaje powiększona na końcu kroku $n = 20$ do wartości $\Delta\lambda = 10 \Delta\lambda$. Przebieg proces deformacji został wyznaczony w zadanej końcowej liczbie kroków obciążania n_{lk} o wartościach 500, 1000 lub 1500, zależnej od początkowej orientacji sieci kryształu. W pierwszym kroku obciążania, w jednym przypadku (dla orientacji o wysokiej symetrii 001) występuje sprężysty stan naprężenia materiału, por. rys. 6.17, a w pozostałych analizowanych orientacjach materiał przechodzi w stan plastyczny.

Rzuty osi rozciągania ND dla orientacji sieci M, T10, T20 znajdują się wewnątrz trójkąta podstawowego, a dla orientacji T0 ([011]), T30 ($\bar{1}12$), 001, $\bar{1}11$ są umiejscowione na brzegach trójkąta podstawowego, por. rys. 6.17. Symbol $T\beta$ oznacza orientację

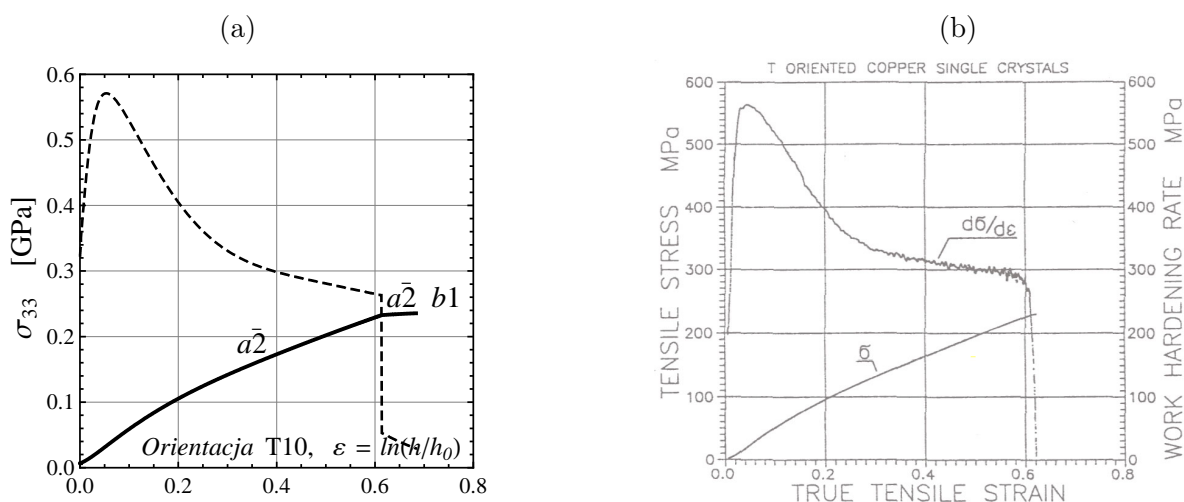
sieci kryształu, gdzie β to wartość kąta mierzonego w stopniach $[\circ]$ między krystalograficznym kierunkiem $[011]$ i początkową orientacją osi rozciągania ND. Rzuty osi ND dla serii orientacji T/β leżą na rzucie koła wielkiego będącego śladem płaszczyzny $(1\bar{1}1)$. Macierz transformacji między układem lokalnym i globalnym ma postaci

$$[\mathbf{Q}^R] = \{\text{ED TD ND}\}, \quad (6.13)$$

gdzie symbole ED, TD, ND, oznaczają wersory wyznaczające oś podłużną, oś poprzeczną i oś rozciągania, względem lokalnego układu K_C .

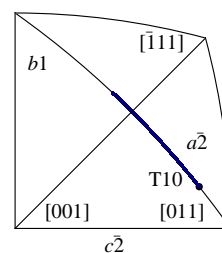
Odształcenie na kierunku rozciągania obliczane w postaci $\varepsilon_{\text{ln}} = \ln(h/h_0)$, zależy od stosunku aktualnej długości próbki h i długości przed wydłużeniem h_0 . Na rysunkach 6.19, 6.21, 6.23, 6.26, 6.27 poniżej, symbol σ_{33} bez poziomej kreski oznacza naprężenie Cauchy'ego względem układu globalnego \bar{K}_S .

Orientacja T10



Rysunek 6.19: Porównanie wyników symulacji numerycznej (a) i wyników eksperymentalnych wg pracy (Szczerba, 2001) (b), przy orientacji **T10**.

Rysunek 6.20: Zmiana położenia osi rozciągania ND widoczna na części rzutu stereograficznego, przy orientacji sieci **T10**.

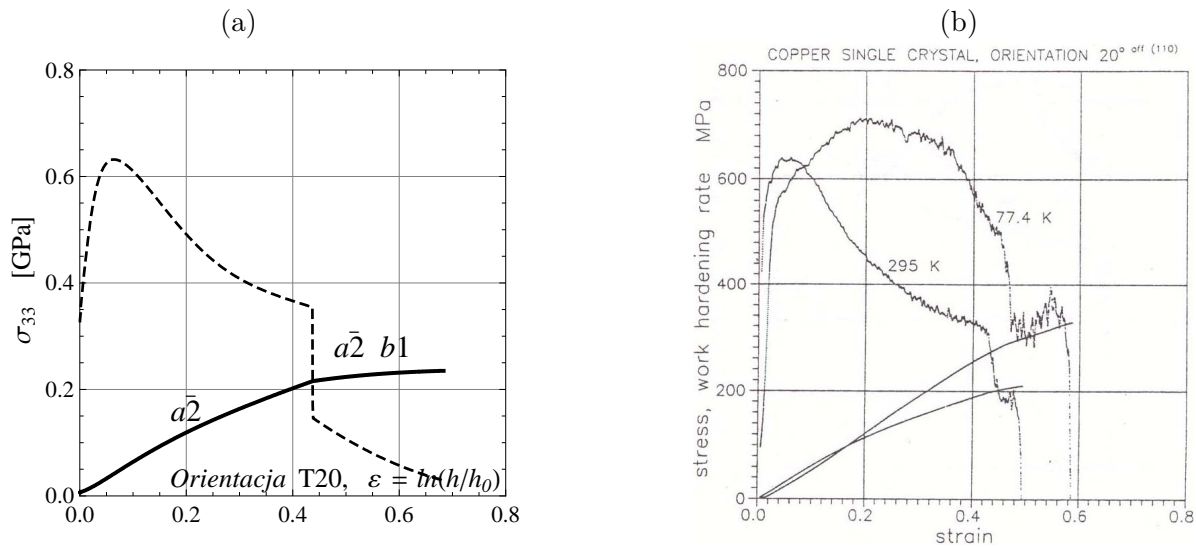


Macierz $[\mathbf{Q}^R] = [\mathbf{Q}_{10^\circ}^{R[1,\bar{1},1]}]\{\text{ED TD ND}\}^T$ orientacji T10 jest iloczynem macierzy obrotu (6.13) obliczonej dla kierunków ED $\rightarrow [1\bar{1}1]$, TD $\rightarrow [21\bar{1}]$, ND $\rightarrow [011]$ wyznaczających orientację T0 oraz macierzy obrotu $[\mathbf{Q}_{10^\circ}^{R[1,\bar{1},1]}]$ wokół osi ED $\rightarrow [1\bar{1}1]$ o kąt 10° . Stałe występujące w opisie wzmocnienia, podane we wstępie tego punktu, zostały tak dobrane, aby krzywa wzmocnienia pasowała do wyniku eksperymentalnego wg pracy (Szczerba, 2001) dla orientacji T10. Stałe materiałowe pozostają identyczne dla wszystkich analizowanych orientacji. Przyjęta końcowa liczba kroków obciążania wynosi $n_{\text{lk}} = 1000$.

Początkowa orientacja osi rozciągania ND umiejscowiona jest wewnątrz trójkąta podstawowego rzutu stereograficznego o wierzchołkach $[001]$, $[011]$ i $[\bar{1}11]$, por. rys. 6.20 (b), więc największą wartość wypadkowego naprężenia ścinającego τ^K osiąga system $a\bar{2}$, rys. 6.20 (a). System poślizgu $a\bar{2}$ jest aktywowany w pierwszym kroku pętli obciążania, wtedy materiał przechodzi w stan plastyczny. Uruchomienie drugiego wtórnego systemu poślizgu $b1$ następuje dopiero po przekroczeniu krystalograficznej linii symetrii $[001]$ - $[\bar{1}11]$ przez oś rozciągania ND.

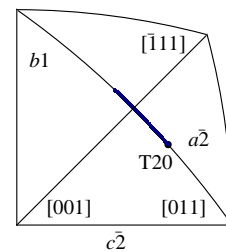
Wartości naprężenia Cauchy'ego $\bar{\sigma}_{33}$ na kierunku rozciągania odpowiadają wynikom eksperymentalnym, których wykres naprężenie-odkształcenie urywa się przy $\varepsilon_{ln} = 0.60$ i naprężeniu o wartości 220 [MPa] (rys. 6.19(b)). Uruchomienie wtórnego systemu poślizgu powoduje nieciągłą zmianę nachylenia wykresu naprężenia, przy odkształceniu o wartości $\varepsilon_{ln} = 0.614$ i naprężeniu 233 [MPa] (rys. 6.19(a)). Widoczny jest skok pochodnej naprężenia, oznaczonej linią przerywaną na rysunku 6.19. Wartości pochodnej naprężenia zostały obliczane dla każdego kroku obciążania za pomocą wzoru w postaci $(\bar{\sigma}_{33}(n+1) - \bar{\sigma}_{33}(n)) / (\varepsilon_{ln}(n+1) - \varepsilon_{ln}(n))$.

Orientacja T20



Rysunek 6.21: Wyniki symulacji numerycznej (a) w porównaniu z wynikami eksperymentalnymi wg pracy (Basiński et al., 1997) (b), przy orientacji **T20**.

Rysunek 6.22: Zmiana orientacji osi rozciągania ND próbki względem sieci kryształu widoczna na części rzutu stereograficznego, przy orientacji **T20**.



Macierz określająca początkową orientację sieci kryształu jest tu zadana w postaci $[\mathbf{Q}^R] = [\mathbf{Q}_{20^\circ}^{R[1,\bar{1},1]}]\{\text{ED TD ND}\}^T$, gdzie $[\mathbf{Q}_{20^\circ}^{R[1,\bar{1},1]}]$ to macierz obrotu o kąt 20° wokół osi $[1\bar{1}1]$, a kierunki próbki $\text{ED} \rightarrow [1\bar{1}1]$, $\text{TD} \rightarrow [21\bar{1}]$, $\text{ND} \rightarrow [011]$. Dane materiałowe

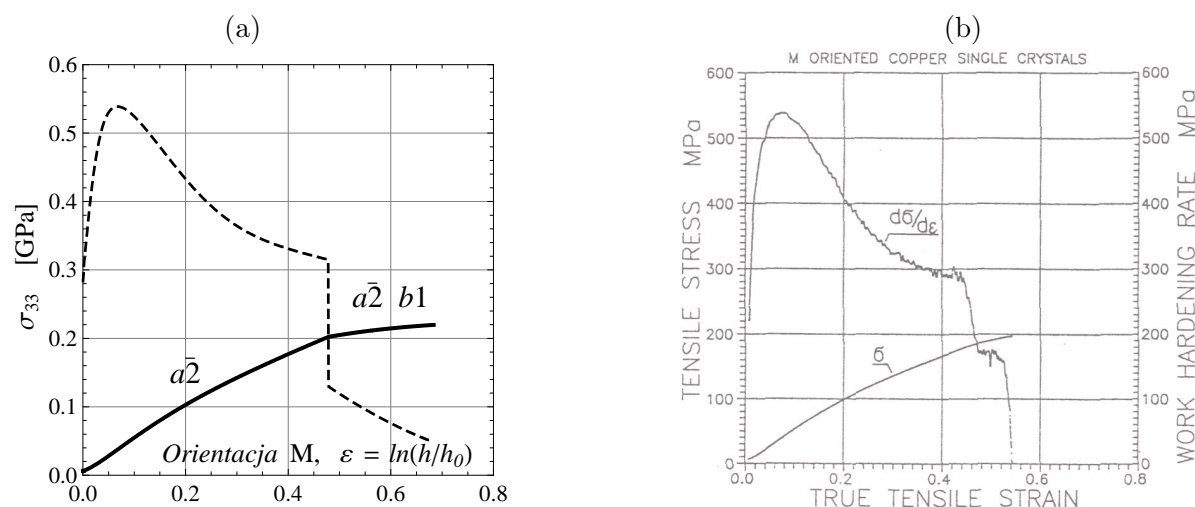
oraz liczba kroków obciążania pozostają zgodne z wartościami analizowanej powyżej orientacji T10.

W pierwszym kroku obciążania aktywowany jest ujemny system poślizgu $a\bar{2}$, następnie przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.438$ zostaje uruchomiony wtórny system $b1$. Sekwencja aktywacji systemów jest identyczna jak w przypadku orientacji T10.

Wyniki symulacji numerycznej, w formie wykresu naprężenia Cauchy'ego $\bar{\sigma}_{33}$ na kierunku rozciągania oraz przyrostów naprężenia w stosunku do przyrostów odkształcenia, zostały porównane z rezultatami eksperymentalnego testu rozciągania monokryształu w temperaturze 295K wg (Basiński et al., 1997). Eksperymentalna krzywa załamuje się przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.43$ i naprężeniu 0.195 GPa (rys. 6.21(b)). Symulacja numeryczna wskazuje, że aktywacja dodatkowego systemu następuje przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.438$ i naprężeniu 0.215 GPa (rys. 6.21(a)). Zgodność jest zadowalająca zważywszy, że krzywa nieliniowego umocnienia została dopasowana przy poprzedniej orientacji T10.

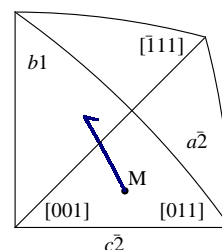
Oś rozciągania ND początkowo tworzy kąt 20° z kierunkiem $[011]$, a gdy ND przesunie się na linię symetrii ten kąt wynosi 30° . Natomiast po przekroczeniu linii symetrii $[001]$ - $[\bar{1}11]$, kąt między osią ND w największym wychyleniu i kierunkiem $[\bar{1}12]$ wynosi 5.43° .

Orientacja M



Rysunek 6.23: Wyniki symulacji numerycznej (a) w porównaniu z wynikami eksperymentalnymi wg pracy (Szczerba, 2001) (b), przy orientacji M.

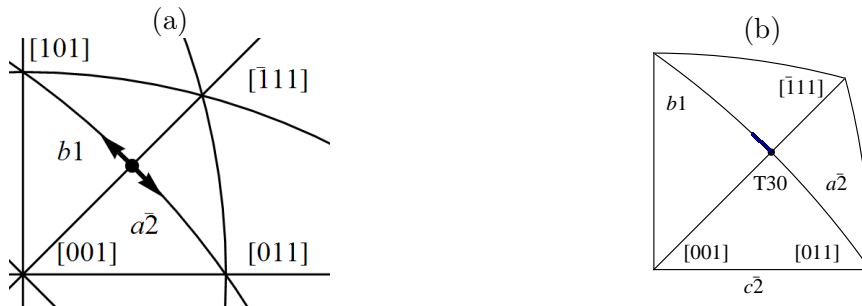
Rysunek 6.24: Zmiana orientacji osi rozciągania ND próbki względem sieci kryształu widoczna na części rzutu stereograficznego, przy orientacji M.



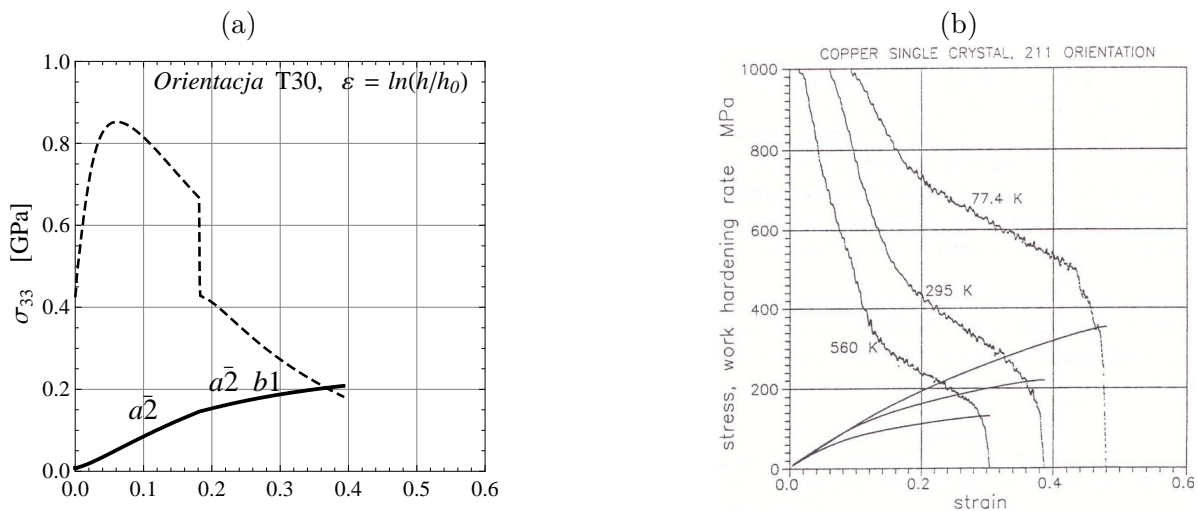
Początkowa orientacja próbki została ustalona przy pomocy macierzy obrotu $[Q^R]$ (6.13), gdzie wersor $ED \rightarrow [\bar{1}45]$, $TD \rightarrow [\bar{1}1\bar{1}]$, $ND \rightarrow [3\bar{2}1]$.

Wyniki eksperymentalnego testu jednoosiowego rozciągania w przypadku orientacji M ujawniają, że przy odkształceniu („true tensile strain”) o wartości około 0.45 i naprężeniu 175 MPa następuje zmiana dominującego systemu poślizgu, por. rys. 6.23 (b). Na podstawie wykresu naprężenie-odkształcenie uzyskanego z wykorzystaniem symulacji numerycznej można zauważyć, że ta zmiana zachodzi przy odkształceniu $\epsilon_{ln} = 0.479$ i naprężeniu Cauchy’ego o wartości 0.202 GPa, por. rys. 6.23 (a).

Orientacja T30



Rysunek 6.25: Zmiana położenia osi rozciągania ND na rzucie stereograficznym dla dwóch równoważnych rozwiązań (a) oraz obliczona zmiana położenia osi ND (b), przy orientacji **T30**.



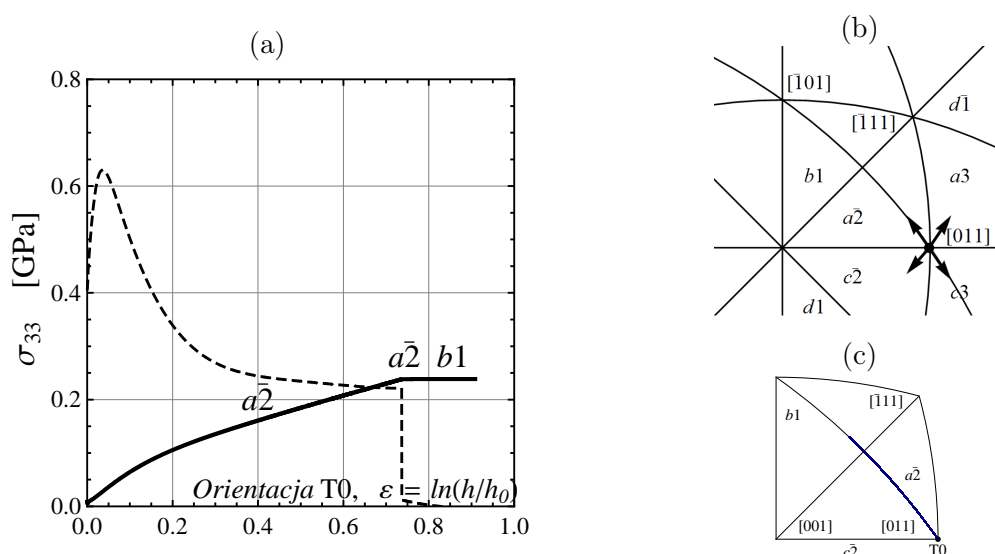
Rysunek 6.26: Wyniki symulacji numerycznej (a) oraz wyniki testu eksperymentalnego wg pracy (Basiński et al., 1997) (b), przy orientacji **T30**.

W przypadku orientacji T30 macierz obrotu (6.13) jest obliczona przy wykorzystaniu wersorów: ED $\rightarrow [1, \bar{1}, 1]$, TD $\rightarrow [1, 1, 0]$, ND $\rightarrow [\bar{1}, 1, 2]$. Rzut osi rozciągania ND wypada na przecięciu dwóch śladów kół wielkich rzutu stereograficznego (6.26). T30 to orientacja symetryczna, więc przy jednoosiowym rozciąganiu dwa systemy poślizgu ($b1, a\bar{2}$) są jednakowo uprawnione do uruchomienia. Wypadkowe naprężenie Schmid’a osiąga największą, jednakową wartość dla systemów ($b1, a\bar{2}$). Możliwe są dwa rozwiązania równoważne pod względem osiąganego minimum energii przyrostowej. W pierwszym etapie rozciągania zostaje aktywowany system, $b1$ następnie, po przekroczeniu krystalograficznej linii symetrii, aktywna jest para ($b1, a\bar{2}$). Alternatywne rozwiązanie

przewiduje początkową aktywację systemu $a\bar{2}$, a następnie $(a\bar{2}, b1)$. Dwa rozwiązania odpowiadają różnym obrotom osi rozciągania, pokazanym jako trajektorie osi ND wychodzące z punktu początkowego położenia na linii symetrii $[001]$ - $[\bar{1}11]$, por. rys. 6.25(a).

Przedstawione tu wyniki dotyczą drugiego z omówionych powyżej rozwiązań, gdzie aktywny jest system pierwotny $a\bar{2}$ i wtórny $b1$. Skokowa zmiana pochylenia wykresu naprężenia, na kierunku rozciągania, występuje przy odkształceniu o wartości $\varepsilon_{ln} = 0.183$ i naprężeniu 146 MPa (rys. 6.26).

Orientacja T0



Rysunek 6.27: Przebieg wartości naprężenia i pochodnej naprężenia Cauchy'ego (a), zmiana położenia osi rozciągania ND względem sieci kryształu dla rozwiązań równoważnych (b) oraz trajektorie osi ND dla jednego rozwiązania (c), przy orientacji **T0**.

Obrót sieci kryształu podczas deformacji z początkowej orientacji T0 do chwili uruchomienia wtórnego systemu poślizgu trwa dłużej niż w przypadku orientacji T10, T20, T30 i M, dlatego końcowa liczba kroków obciążania została powiększona do $n_{lk} = 1500$.

Trzy wersory ED $\rightarrow [1, \bar{1}, 1]$, TD $\rightarrow [2, 1, \bar{1}]$, ND $\rightarrow [0, 1, 1]$ tworzą macierz przejścia (6.13) między lokalnym i globalnym układem współrzędnych orientacji T0. W początkowej orientacji osi rozciągania ND jednakowe wypadkowe ścinające naprężenie Schmid'a czterech systemów ($a3, c3, a\bar{2}, c\bar{2}$) osiąga największą wartość. Z pośród tej czwórki minimalizacja energii przyrostowej selekcjonuje jeden pierwotny system aktywny. Po przejściu śladu osi ND poza krystalograficzną linię symetrii (np. rys. 6.27(c)), na końcu etapu „przestrzelenia” aktywowany jest wtórny system poślizgu. Możliwe są cztery równoważne rozwiązania (rys. 6.27(b)) i odpowiadające tym rozwiązaniom cztery pary systemów aktywnych, są to odpowiednio: $(a\bar{2}, b1)$, $(c\bar{2}, d1)$, $(c3, b\bar{1})$, $(a3, d\bar{1})$. Pierwszy system z pary oznacza pierwotny, a drugi oznacza wtórny system poślizgu. Zamieszczone na rysunku 6.27 rozwiązanie dotyczy przypadku, gdy aktywnymi systemami są $(a\bar{2}, b1)$.

Na wykresie przebiegu naprężenia na kierunku rozciągania $\bar{\sigma}_{33}$ (rys. 6.27(a)), przy odkształceniu o wartości $\varepsilon_{ln} = 0.737$ i naprężeniu 238 MPa uruchomiony zostaje wtórny system poślizgu. Uruchomienie wtórnego systemu $b1$ powoduje skokową zmianę wartości pochodnej naprężenia.

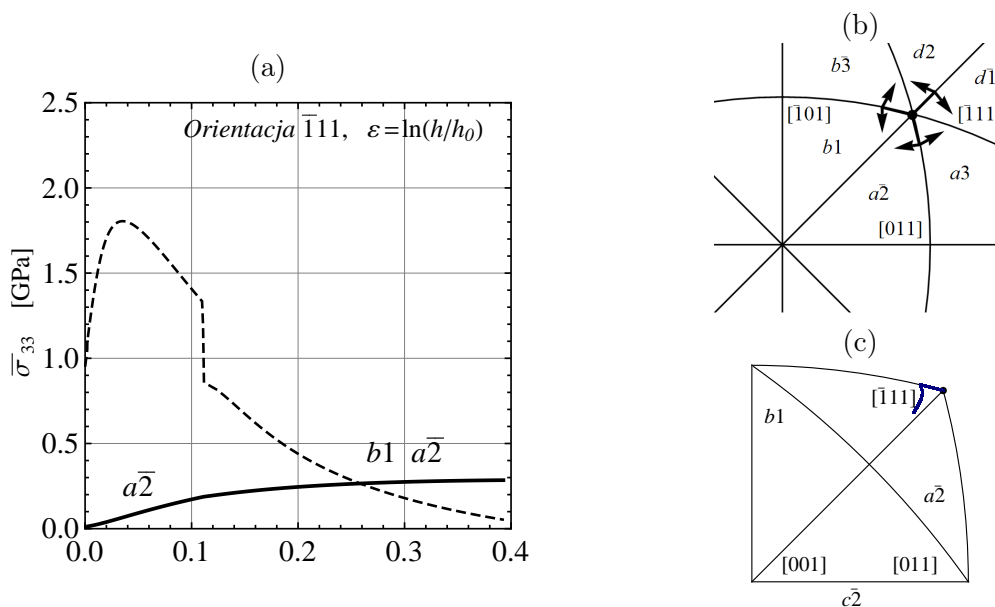
6.1.5 Obciążanie w kierunkach o wysokiej symetrii

Poślizg wielokrotny może wystąpić podczas jednoosiowego rozciągania wzdłuż osi o wysokiej symetrii kryształu ($[100]$ lub $[111]$), gdzie kilka systemów posiada równe wartości naprężeń ścinających, por. (Franciosi & Zaoui, 1982a). Analogiczna sytuacja może wystąpić przy innych schematach deformacji, np. czystym ścinaniu $(100)[010]$ (czyli w płaszczyźnie (100) na kierunku $[010]$), ściskaniu na kierunku $[100]$ wraz ze ścinaniem $(100)[011]$ oraz ścinaniu $(100)[010] + (110)[110]$, por. (Kocks, 1960).

Praca (Franciosi & Zaoui, 1982a) zawiera porównanie wyników eksperymentalnych z rozważaniami teoretycznymi, które bazują na kryterium energetycznym odmiennym od przyjętego w niniejszej rozprawie. Rozważania teoretyczne dotyczą określania aktywnych systemów poślizgu z uwzględnieniem obrotów sieci i wzmocnienia. Wyniki tych teoretycznych rozważań są w zgodzie z obserwacjami eksperymentalnymi dla metali, także w zakresie dużych deformacji. Przytoczane badania eksperymentalne i teoretyczne wykazują, że rozciąganie na kierunku $\langle 112 \rangle$ daje poślizg podwójny na systemach stowarzyszonych typu $a\bar{2}/b1$ (ang. conjugate systems). Natomiast dla rozciągania typu $\langle 111 \rangle$ Franciosi & Zaoui (1982a) ustalili symetryczny poślizg potrójny na systemach $a\bar{2}/b\bar{3}/d1$, który odbywa się bez obrotu sieci. Eksperymenty wykazują, że taki poślizg występuje początkowo na dwóch, a ostatecznie na trzech systemach.

Inne interesujące obserwacje eksperymentalne, dotyczące deformacji monokryształów aluminium oraz miedzi w teście jednoosiowego rozciągania, można znaleźć w pracach, odpowiednio (Saeki & Miura, 1977) i (Miura et al., 1977). Eksperymenty tam zamieszczone wykazują, że rozciąganie typu $\langle 100 \rangle$ powoduje obrót osi rozciągania z początkowego położenia w kierunku $\langle 111 \rangle$, przy poślizgu zachodzącym na dwóch systemach.

Orientacja $\bar{1}11$ o wysokiej symetrii



Rysunek 6.28: Wykres naprężenia i pochodnej naprężenia Cauchy'ego (a), zmiana orientacji osi ND względem sieci krystalograficznej (b) oraz obliczona dla jednego rozwiązania trajektorie osi ND (c), przy orientacji $\bar{1}11$.

Oś rozciągania ND kryształu leży wzdłuż krystalograficznego kierunku $[\bar{1}11]$. Macierz przejścia $[\mathbf{Q}^R]$ między układem lokalnym i globalnym jest zbudowana z wersorów wyznaczających trzy kierunki: $ED \rightarrow [1, \bar{1}, 2]$, $TD \rightarrow [1, 1, 0]$, $ND \rightarrow [\bar{1}, 1, 1]$, por. (6.13). Zadana liczba kroków obciążania $n_{lk} = 500$ odpowiada odkształceniu końcowemu $\varepsilon_{ln} = 0.39$. W tym przypadku została użyta procedura minimalizacji energii wykorzystująca funkcję `NMinimize`⁶ programu Mathematica.

W orientacji $\bar{1}11$ o wysokiej symetrii występuje sześć systemów równoważnych ($a3$, $b1$, $d2$, $a\bar{2}$, $b\bar{3}$, $d\bar{1}$), gdzie wypadkowe naprężenie ścinające τ^K osiąga najwyższą (jednakową) wartość. W teście rozciągania możliwych jest sześć równoważnych pod względem energetycznym rozwiązań (6.28(b)). W pierwszym etapie aktywowany jest jeden z sześciu systemów poślizgu. Obrót osi ND przebiega na jednej z trzech płaszczyzn przechodzących przez $[\bar{1}11]$. Gdy uruchomiony zostaje dodatkowy system i poślizg zachodzi na dwóch systemach, ślad osi ND zmienia kierunek ruchu i zbliża się do innej płaszczyzny krystalograficznej. W drugim etapie rozciągania poślizg zachodzi na dwóch systemach.

Zamieszczone wyniki (rys. 6.28(a) i (c)) dotyczą rozwiązania, gdy aktywne systemy to ($a\bar{2}$, $b1$), przy czym system $a\bar{2}$ został uruchomiony jako pierwszy (6.28(c)). Poślizg na dwóch systemach jest poprzedzony krótkim etapem poślizgu na systemie $b1$, gdy system $a\bar{2}$ jest chwilowo zatrzymywany. Przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.112$ i naprężeniu $\bar{\sigma}_{33}$ o wartości 188 MPa występuje nieciągła zmiana nachylenia wykresu naprężenia (6.28(a)).

Orientacja 001 o wysokiej symetrii

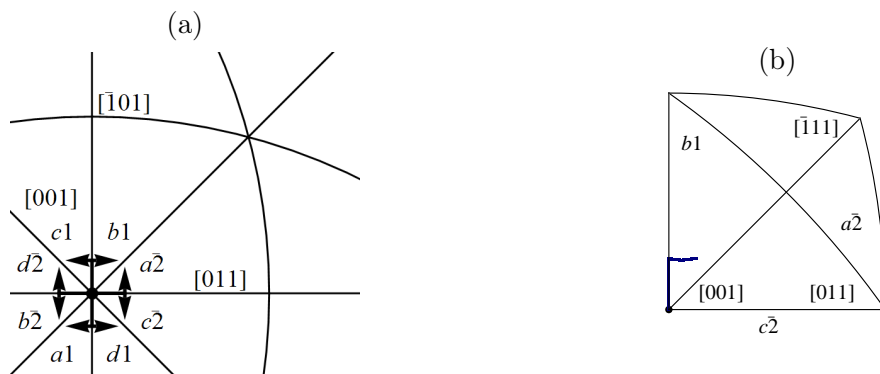
W przypadku orientacji sieci oznaczonej symbolem 001 i deformacji zadanej w układzie globalnym w postaci (6.10) macierz obrotu $[\mathbf{Q}^R]$ (5.15) jest macierzą jednostkową, więc kąty Eulera przyjmują wartości $\varphi_1 = \Phi = \varphi_2 = 0$. Końcowa liczba kroków obciążania wynosi $n_{lk} = 500$.

W orientacji 001 oś rozciągania ND pokrywa się z krystalograficznym kierunkiem $[001]$. Ośmiu systemów ($a1$, $b1$, $c1$, $d1$, $a\bar{2}$, $b\bar{2}$, $c\bar{2}$, $d\bar{2}$) posiada wypadkowe naprężenie ścinające τ^K o jednakowej najwyższej wartości w początkowej orientacji sieci, por. rys. 6.29(a). Przy zastosowaniu macierzy fizycznych modułów wzmocnienia z jednym parametrem wzmocnienia utajonego q , w postaci (2.58), minimalizacja energii przyrostowej preferuje rozwiązanie z pojedynczym systemem aktywnym w początkowym etapie rozciągania.

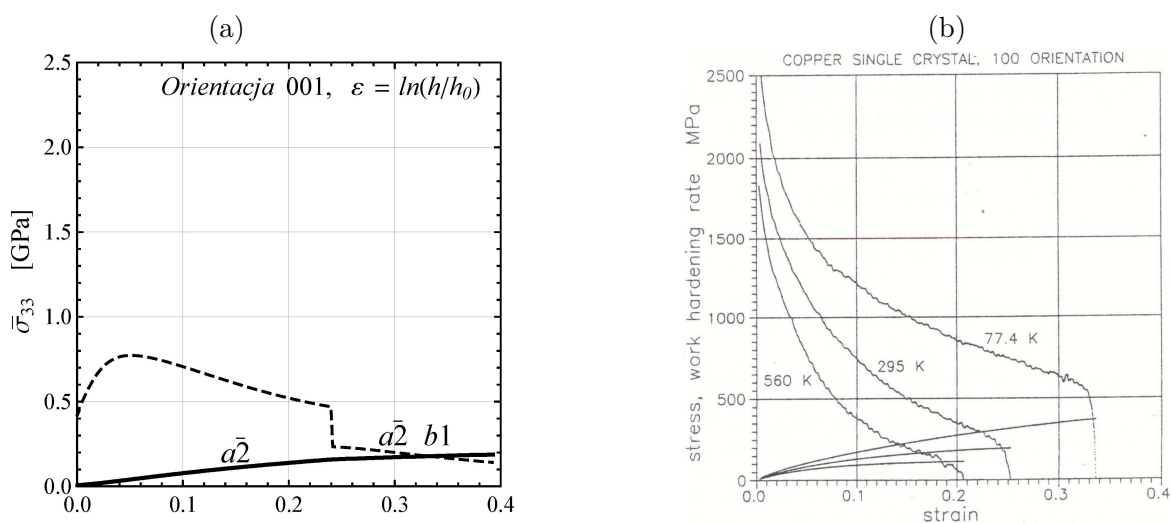
Pojedynczy system $a\bar{2}$ płynie do odkształcenia $\varepsilon_{ln} = 0.24$, wówczas nowy system $b1$ zostaje uruchomiony, a poprzedni $a\bar{2}$ zatrzymany. Sieć kryształu podlega obrotom, tak że rzut osi rozciągania ND przesuwają się po linii symetrii $[001] - [\bar{1}01]$. Od odkształcenia $\varepsilon_{ln} = 0.26$ płyną jednocześnie dwa systemy poślizgu ($a\bar{2}$, $b1$). Wówczas zmienia się charakter obrotu sieci i rzut osi ND przesuwają się w kierunku linii $[001] - [\bar{1}11]$, odmiennie niż w orientacji 100 zamieszczonej poniżej, gdzie zastosowano inną postać macierzy wzmocnienia.

Wykres naprężenie-odkształcenie (rys. 6.30(a)) ma charakter zbliżony do wyników eksperymentalnych dla temperatury 295K zamieszczonych w pracy (Basiński et al., 1997), por. rys. 6.30(b). Zamiana systemów aktywnych odpowiada chwili, gdy wystąpiła lokalizacja próbki w badaniu eksperymentalnym.

⁶NMinimize służy do numerycznego znajdowania minimum, także globalnego.



Rysunek 6.29: Zmiany położenia osi ND dla rozwiązań równoważnych (b) oraz trajektoria osi ND wyznaczona dla jednego rozwiązania (c), przy orientacji 001 .



Rysunek 6.30: Wyniki symulacji numerycznej w postaci wykresu naprężenia Cauchy'ego i pochodnej naprężenia Cauchy'ego (a) oraz wyniki testu eksperymentalnego wg pracy (Basiński et al., 1997) (b), przy orientacji 001 .

Orientacja 100 o wysokiej symetrii

Saeki & Miura (1977) przedstawiają wyniki rozciągania jednoosiowego płytki wykonanej z monokryształu aluminium o czystości 99.99%, wyżarzanej w temperaturze 823K przez 3 godziny. Test rozciągania został przeprowadzony w temperaturze $293 \pm K$, z prędkością $4 \times 10^{-5} s^{-1}$. Początkowy kierunek rozciągania monokryształu pokrywa się z $\langle 100 \rangle$.

Podczas testu eksperymentalnego zaobserwowano na powierzchni próbki trzy obszary różne pod względem aktywnych systemów. Dwa obszary znajdowały się w pobliżu zamocowań, a jeden obszar w środku próbki. We wszystkich obszarach charakter deformacji jest podobny, więc omówiony jest tu jeden wybrany obszar, przy górnym mocowaniu próbki oznaczony jako A (obszar przy dolnym mocowaniu to A'). W początkowym etapie deformacji, do około 1.5-2% odkształcenia, w całej próbce występuje poślizg wielokrotny, wówczas sieć nie ulega obrotom. Następnie, ujawniają się widoczne na powierzchni próbki trzy obszary o różnych systemach aktywnych. W dwóch skrajnych obszarach oznaczonych jako A i A', aktywne są po dwa systemy $(111)[10\bar{1}]$ i $(\bar{1}\bar{1}1)[10\bar{1}]$, a oś rozciągania zmienia orientację i biegnie po linii $[100]-[10\bar{1}]$ w kierunku

$[10\bar{1}]$, por. rys. 6.31(b). W kolejnym etapie deformacji, od około 18% do 40% wydłużenia dominuje pojedynczy system poślizgu $(1\bar{1}\bar{1})[110]$. Sieć zmienia kierunek obrotu, w związku z tym oś rozciągania przechodzi z linii $[100]$ - $[10\bar{1}]$ - $[11\bar{1}]$ i biegnie w kierunku linii $[100]$ - $[11\bar{1}]$. Powyżej 40% wydłużenia próbki, ponownie zachodzi poślizg na dwóch systemach, płynącym poprzednio systemie $(1\bar{1}\bar{1})[110]$ oraz systemie $(111)[10\bar{1}]$ aktywnym w drugim etapie deformacji. Oś rozciągania zmienia kierunek obrotu, osiąga, a następnie przemieszcza się wzdłuż linii symetrii $[100]$ - $[11\bar{1}]$ w kierunku $[21\bar{1}]$.

W modelowanym procesie deformacji przyjęto początkową orientację osi rozciągania ND wzdłuż kierunku $[100]$ sieci kryształu. Sieć kryształu jest dodatkowo wstępnie obrócona wokół kierunku rozciągania $[100]$ o kąt 26° , zgodnie z warunkami eksperymentu (Saeki & Miura, 1977) według reguły śruby prawoskrętnej. Przyjęte w modelowaniu wartości modułów sprężystości Al to $C_{11}^* = 108$ GPa, $C_{12}^* = 62$ GPa, $C_{44}^* = 28$ GPa, wg pracy (Schmid & Boas, 1950).

Przyjęto rozróżnienie rodzajów wzajemnego oddziaływania pary systemów K i J wg pracy (Franciosi & Zaoui, 1982a), więc macierz fizycznych modułów wzmocnienia jest w postaci (2.61). W modelowaniu procesu rozciągania zastosowano prawo wzmocnienia o wysyceniowym charakterze (2.63) z prędkością samoumocnienia zadaną w postaci (2.62). Wartości granicy plastyczności $\tau_0 = 12$ MPa, moduł początkowego wzmocnienia $h_0 = 190 \tau_0$ MPa oraz $\tau_s = 7.92 \tau_0$ MPa są identyczna dla wszystkich systemów. Przyjęto następujące wartości $sh = 1$, $cl = hl = cp = gj = 1.2$, $lc = 1.3$ modułów wzmocnienia utajonego uwzględniające wzajemne oddziaływanie dyslokacji poruszających się na różnych systemach, por. tab. 2.4.

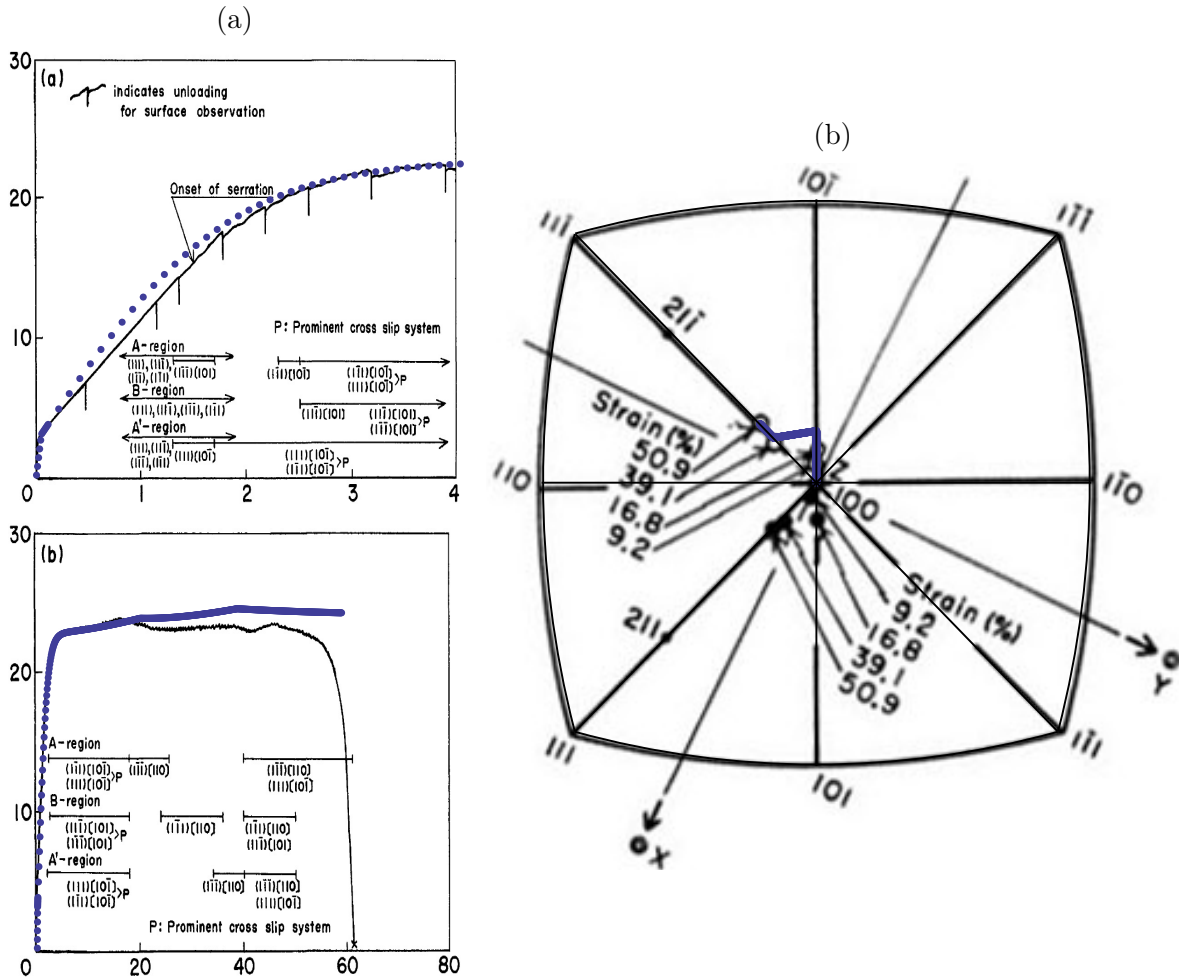
Tablica 6.3: Wyniki modelowania w przypadku orientacji **100**: wartości odkształcenia, naprężenia oraz kolejność uruchamiania systemów poślizgu.

Odkształcenie $\bar{\epsilon}_{33}$ [%]	Naprężenie $\bar{\sigma}_{33}$ [MPa]	Systemy aktywne
0.05	29.7	$d2 = (1\bar{1}1)[10\bar{1}]$
19.5	236.9	$c\bar{3} = (\bar{1}11)[\bar{1}\bar{1}0]$
37.8	243.5	$(a2 = (111)[10\bar{1}], c\bar{3})$
59.0 (koniec)	240.4	–

Rozwiązanie otrzymane w modelowanym procesie, por. rys. 6.31, ma przebieg podobny do obserwacji zamieszczonych w pracy (Saeki & Miura, 1977). W pierwszym etapie deformacji zaraz po stanie czysto sprężystym jako pierwszy zostaje aktywowany pojedynczy system poślizgu $d2$, por. tab. 6.3, a sieć kryształu podlega obrotowi wzdłuż linii $[001]$ - $[\bar{1}01]$, por. rys. 6.31(b). W wyniku obrotu, przy wydłużeniu 19.5%, następuje wymiana systemów aktywnych z $d2$ na system $c\bar{3}$ oraz równocześnie następuje zmiana kierunku obrotu sieci, tak że oś rozciągania ND kieruje się do linii $[001]$ - $[\bar{1}\bar{1}1]$. W chwili gdy ND osiągnie tę linię zostaje aktywowany dodatkowy system poślizgu $a2$ (w jakiej odległości to nastąpi oraz czy nastąpi tuż przed, czy za tą linią, zależy od przyjętych parametrów wzmocnienia). Poślizg na dwóch systemach ($a2, c\bar{3}$) powoduje zmianę kierunku obrotu sieci, tak że oś rozciągania obraca się w kierunku $[21\bar{1}]$.

Systemy aktywne podczas procesu rozciągania dla orientacji 100 są współliniowe $d2 \leftrightarrow a2$, więc ich oddziaływanie określa parametr $cl = a_1$, por. tab. 2.4. Oddziaływanie systemów $d2 \leftrightarrow c\bar{3}$ (ang. „cross-slip”) określa parametr $gj = a_4$, natomiast oddziaływanie

systemów $c\bar{3} \leftrightarrow a2$ jest określone przez parametr $lc = a_5$.



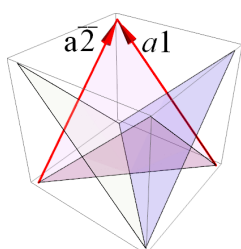
Rysunek 6.31: Wyniki modelowania (zaznaczone kolorem niebieskim) nałożone na obserwacje eksperymentalne wg pracy (Saeki & Miura, 1977): przebieg naprężenia Cauchy'ego $\bar{\sigma}_{33}$ przy rosnącym wydłużeniu $\bar{\epsilon}_{33}$ [%] (a) oraz trajektoria osi rozciągania (b), przy początkowej orientacji **100**.

Przedstawione w punktach (6.1.4) i (6.1.5) wyniki modelowania jednoosiowego rozciągania uzyskano z zastosowaniem metody minimalizacji energii przyrostowej przy sterowaniu z kinematycznymi stopniami swobody. Wyniki modelowania porównano z dostępnymi obserwacjami eksperymentalnymi monokryształów miedzi i aluminium dla różnych początkowych orientacji sieci kryształu. W punkcie (6.1.5) pokazano, że dopasowanie krzywej wzmocnienia do wyników, tylko dla jednej orientacji T10, pozwala na przewidywanie przebiegu krzywych naprężenia dla innych orientacji sieci kryształu zgodnie z eksperymentami wg (Basiński et al., 1997), (Szczerba, 2001). Zastosowanie fizycznych modułów wzmocnienia w postaci (2.61), z rozróżnieniem charakteru wzajemnego oddziaływania systemów aktywnych, umożliwi modelowanie rozciągania na kierunkach o wysokiej symetrii kryształu. Wówczas, gdy rozwiązanie jest niejednoznaczne, metoda minimalizacji energii przyrostowej selekcjonuje aktywne systemy obserwowane eksperymentalnie, por. (Saeki & Miura, 1977).

6.2 Modelowanie deformacji z uwzględnieniem podziału na podziarna

6.2.1 Pełna kontrola kinematyczna. Porównanie wyników numerycznej symulacji z podziałem i bez podziału ziarna

Rozpatrzmy przykład podziału ziarna na dwa podziarna przy pełnej kontroli kinematycznej makroskopowego gradientu deformacji $\bar{\mathbf{F}}$. Zadawany makroskopowy gradient deformacji $\bar{\mathbf{F}}$ (6.1) określa proste ścinanie próbki. Kierunek $\bar{\mathbf{M}}$ i płaszczyzna ścinania $\bar{\mathbf{N}}$ są w tym przypadku tak dobrane, że powodują poślizg plastyczny tylko na dwóch współpłaszczyznowych systemach, tutaj są to $a1$ i $a\bar{2}$. Gradient $\bar{\mathbf{F}}(\lambda)$ jest dany w postaci funkcji parametru obciążania λ (6.14) i składa się z dwóch członów odpowiadają-



Rysunek 6.32: Systemy poślizgu $a1$ i $a\bar{2}$ płaszczyzny $\mathbf{n}^a = (111)$.

$$\bar{\mathbf{F}}(\lambda) = \mathbf{1} + \lambda \frac{1}{2} (\mathbf{m}^{a1} + \mathbf{m}^{a\bar{2}}) \otimes \mathbf{n}^a \quad (6.14)$$

cych za ścinanie na kierunku $a1$ i kierunku $a\bar{2}$. Obydwa kierunki leżą w płaszczyźnie $\mathbf{n}^a = (111)$, por. rys. 6.32. Kierunek ścinania to $\bar{\mathbf{M}} \rightarrow [\bar{1}\bar{1}2]$, a płaszczyznę wyznacza wersor $\bar{\mathbf{N}} \rightarrow \mathbf{n}^a = (111)$. Próbką nie jest wstępnie obrócona, więc jej orientację określają kąty Eulera o wartościach $\varphi_1 = \Phi = \varphi_2 = 0$.

W celu porównania rozwiązań, symulację procesu deformacji przeprowadzono niezależnie dla jednorodnej deformacji pojedynczego ziarna oraz przy podziale na podziarna.

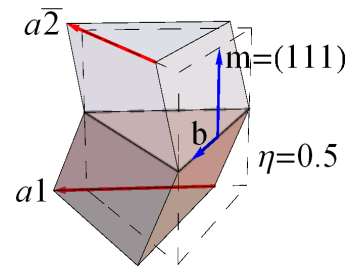
W procesie prowadzonym bez możliwości podziału ziarna, systemy poślizgu $\{a1, a\bar{2}\}$ są uruchamiane w pierwszym kroku obciążania i pozostają aktywne do końca procesu deformacji. Obydwa systemy $\{a1, a\bar{2}\}$ płyną równocześnie mając identyczne przyrosty ścinania $\Delta\gamma^{a1} = \Delta\gamma^{a\bar{2}} \simeq \frac{\Delta\lambda}{2} > 0$. Równoczesny poślizg powyższych systemów nie powoduje obrotu sieci kryształu podczas procesu deformacji.

W procesie prowadzonego z dopuszczeniem możliwości podziału ziarna, podział na dwa podziarna o przyrostach gradientów deformacji

$$\Delta\mathbf{F}_1 = \Delta\bar{\mathbf{F}} + (1 - \eta) \Delta\mathbf{b} \otimes \mathbf{m}, \quad \Delta\mathbf{F}_2 = \Delta\bar{\mathbf{F}} - \eta \Delta\mathbf{b} \otimes \mathbf{m}, \quad (6.15)$$

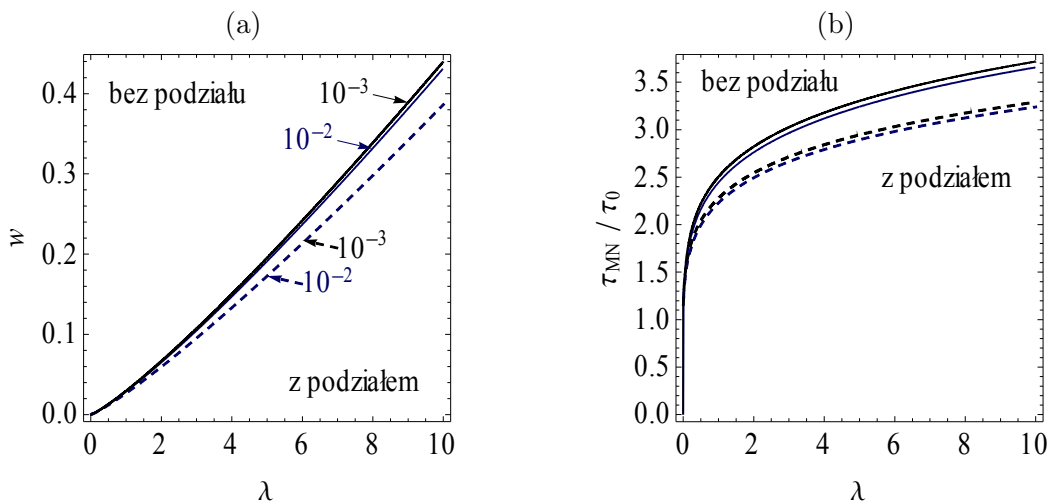
następuje już w pierwszym kroku obciążania. Możliwe są dwa równoważne rozwiązania, dla których w jednym z podziaren płynie tylko system $a1$, a w drugim podziarnie system $a\bar{2}$. Udział objętościowy obliczony w pierwszym kroku wynosi $\eta = 0.5$, natomiast powierzchnia rozdziału to płaszczyzna oktaedryczna (111) czyli ta, na której wymuszony jest poślizg, por. (6.14). W każdym kroku deformacji obliczane są aktualne wartości przyrostów ścinania $\Delta\gamma^{a1} = \Delta\gamma^{a\bar{2}}$ systemów aktywnych oraz przyrost wektora $\Delta\mathbf{b} = \Delta\lambda (\mathbf{m}^{a1} - \mathbf{m}^{a\bar{2}})$, por. rys. 6.33. Podczas procesu deformacji sieć dwóch podziaren nie podlega obrotom. Gradienty całkowitej deformacji podziarna 1 i 2 mają postać (6.16).

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= \mathbf{1} + \lambda \mathbf{m}^{a1} \otimes \mathbf{n}^a, \\ \mathbf{F}_2 &= \mathbf{1} + \lambda \mathbf{m}^{a\bar{2}} \otimes \mathbf{n}^a. \end{aligned} \quad (6.16)$$



Rysunek 6.33: Zdeformowane podziarna z aktywnymi systemami oznaczonymi strzałkami w kolorze czerwonym. Końcowa wartość parametru obciążania wynosi $\lambda = 0.5$.

Podział zachodzi, ponieważ przyrost energii dostarczanej podczas procesu deformacji do podzielonego ziarna jest mniejszy niż przyrost energii ziarna jednorodnego. Można porównać pracę odkształcenia w i naprężenie ścinające τ_{MN} obliczone podczas deformacji ziarna jednorodnego i podzielonego. Porównanie przeprowadzono przy dwóch różnych długościach przyrostu parametru obciążania. Wyniki przyrostu $\Delta\lambda = 10^{-2}$ oznaczone są kolorem niebieskim, a dla przyrostu $\Delta\lambda = 10^{-3}$ kolorem czarnym (rys. 6.34). Na końcu procesu deformacji parametr obciążania osiąga wartość $\lambda = 10$. Różnice w wartościach pracy odkształcenia w wyznaczonych z podziałem i bez podziału, gdy parametr $\lambda = 10$, wynoszą odpowiednio, $w_{sg} - w_{gsd} = 0.0447$ przy $\Delta\lambda = 10^{-2}$ i $w_{sg} - w_{gsd} = 0.0466$ przy $\Delta\lambda = 10^{-3}$. Różnice wartości końcowego naprężenia wynoszą $(\tau_{MNsg} - \tau_{MNgsd})/\tau_0 = 0.416$ przy $\Delta\lambda = 10^{-2}$ i $(\tau_{MNsg} - \tau_{MNgsd})/\tau_0 = 0.427$ przy $\Delta\lambda = 10^{-3}$. Skrócenie długości przyrostu parametru obciążania spowodowało zwiększenie różnic w wartościach pracy odkształcenia w i naprężenia ścinającego τ_{MN} , obliczonych bez i z podziałem na podziarna.



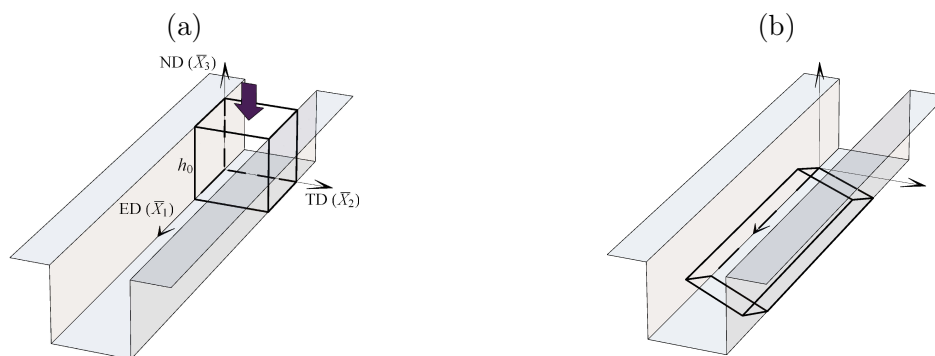
Rysunek 6.34: Deformacja ziarna: praca odkształcenia w (a) i naprężenie ścinające τ_{MN} (b) obliczone, bez podziału ziarna (linie ciągłe) oraz z podziałem (linie przerywane), dla dwóch długości przyrostu parametru obciążania $\Delta\lambda = 10^{-2}$ i $\Delta\lambda = 10^{-3}$.

6.2.2 Częściowa kontrola kinematyczna. Próba kanalikowa i ściskanie w p.s.o.

Modelowanie procesu deformacji kryształu w trakcie próby kanalikowej (ang. channel-die compression test) i w trakcie ściskania w płaskim stanie odkształcenia (p.s.o.) (ang. plane strain compression test) przeprowadzono z wykorzystaniem algorytmu minimalizacji energii przyrostowej z dopuszczeniem możliwości podziału na podziarna, por. podrozdział 5.5, oraz z kinematycznymi stopniami swobody jak w podrozdziale 5.4.

Numeryczna symulacja próby kanalikowej oraz porównanie z wynikami eksperymentalnymi

Przedstawione w niniejszym punkcie wyniki dotyczą modelowania z możliwością podziału ziarna. W celu porównania rozwiązań zamieszczono tu wybrane wyniki modelowania bez możliwości podziału (rys. 6.36(b)).



Rysunek 6.35: Początkowa konfiguracja materiału (a) oraz obliczona końcowa konfiguracja w przypadku orientacji „Strange” (b).

Proces deformacji w próbie kanalikowej, por. rys. 6.35, polega na ścisnieniu materiału na kierunku ND (\bar{e}_3) przy zablokowanej możliwości wydłużania na kierunku poprzecznym TD (\bar{e}_2), z jednoczesną swobodą deformacji na kierunku podłużnym ED (\bar{e}_1). Testy eksperymentalne są prowadzone tak, aby zmniejszyć wpływ tarcia występującego na ściankach kanału (Darrieulat et al., 2007). W trakcie procesu ściskania, przy deformacji materiału na kierunku podłużnym ED może powstawać ścinanie w płaszczyznach ED - TD (1-2) i ED - ND (1-3).

Modelowanie ściskania w próbie kanalikowej odbywa się poprzez zadawanie parametru obciążania $\lambda = \hat{\tilde{F}}_{33}$, czyli składowej tensora gradientu deformacji $\bar{\mathbf{F}}$ (4.86) względem układu globalnego \bar{K}_S , por. (6.17)₁. Nieznane składowe $\hat{\tilde{F}}_{11}$, $\hat{\tilde{F}}_{12}$ i $\hat{\tilde{F}}_{13}$ to stopnie swobody w kinematycznie kontrolowanym procesie. Pozostałe składowe tensora gradientu deformacji $\bar{\mathbf{F}}$ w układzie globalnym \bar{K}_S są zadane. Odpowiedź materiału w naprężeniach Kirchhoffa $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ (lub Cauchy’ego $\bar{\boldsymbol{\sigma}}$), por. (6.17)₂, wynika z przyjętych ograniczeń kinematycznych (6.17)₁, więc $\hat{\tilde{\tau}}_{22}$, $\hat{\tilde{\tau}}_{33}$ i $\hat{\tilde{\tau}}_{23}$ to nieznane składowe makroskopowego tensora $\bar{\boldsymbol{\tau}}$.

$$\bar{\mathbf{F}} \sim \begin{bmatrix} \hat{\tilde{F}}_{11} & \hat{\tilde{F}}_{12} & \hat{\tilde{F}}_{13} \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}, \quad \bar{\boldsymbol{\tau}} \sim \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{\tilde{\tau}}_{22} & \hat{\tilde{\tau}}_{23} \\ 0 & \hat{\tilde{\tau}}_{32} & \hat{\tilde{\tau}}_{33} \end{bmatrix}. \quad (6.17)$$

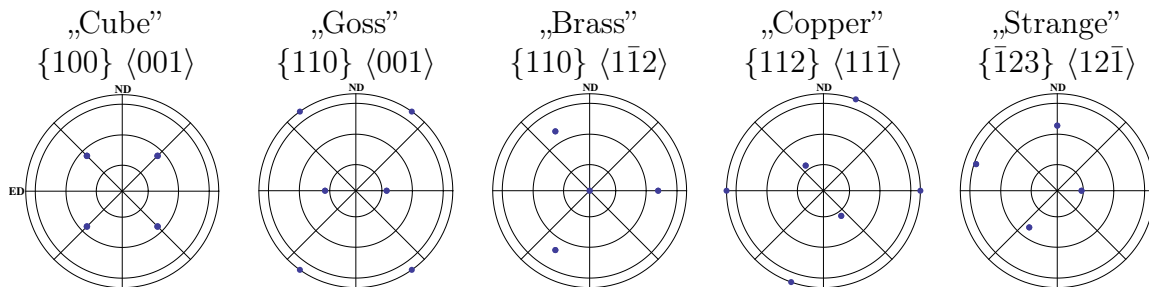
W celu porównania wyników modelowania (rys. 6.36(a) i (b)) z wynikami eksperymentalnymi (rys. 6.36(c)), przeprowadzono symulacje numeryczne deformacji kryształu Al-1%Mn z modułami sprężystości o wartościach $C_{11}^* = 106.75$ GPa, $C_{12}^* = 80.41$ GPa, $C_{11}^* = 28.34$ GPa. Charakter krzywej wzmocnienia został dobrany tak, aby obliczony przebieg naprężenia odpowiadał wartościom wyznaczonym eksperymentalnie przy orientacji „Goss”, por. rys. 6.36(c). Zastosowano fizyczne moduły wzmocnienia w postaci (2.58) z parametrem wzmocnienia utajonego $q = 1.4$. Przebieg wzmocnienia ma potęgowy charakter (2.64) z modułem początkowym $h_0 = 2.1$ GPa i stałym wykładnikiem $n = 0.19$. W modelowaniu zastosowano metodę selektywnej symetryzacji (3.13) z parametrem $r = 1/2$. Przyjęta do obliczeń granica plastyczności wynosi $\tau_0 = 8$ MPa.

Tablica 6.4: Początkowe orientacje kryształu stosowane m.in. w próbie kanalikowej, wyznaczone poprzez indeksy Millera oraz kąty Eulera.

Orientacja	Indeksy Millera	Kąty Eulera ($\varphi_1, \Phi, \varphi_2$)
„Cube”	$\{100\}\langle 001\rangle$	$(0^\circ, 0^\circ, 0^\circ)$
„Goss”	$\{110\}\langle 001\rangle$	$(0^\circ, 45^\circ, 0^\circ)$
„Brass”	$\{110\}\langle 1\bar{1}2\rangle$	$(35.264^\circ, 45^\circ, 0^\circ)$
„Copper”	$\{112\}\langle 11\bar{1}\rangle$	$(90^\circ, 35.264^\circ, 45^\circ)$
S (S3 ⁷)	$\{213\}\langle \bar{3}\bar{6}4\rangle$	$(58.980^\circ, 36.699^\circ, 63.435^\circ)$
S1 ⁷	$\{124\}\langle 21\bar{1}\rangle$	$(59^\circ, 29^\circ, 63^\circ)$
S2 ⁷	$\{123\}\langle 41\bar{2}\rangle$	$(47^\circ, 37^\circ, 63^\circ)$
„Strange” ⁸	$\{\bar{1}23\}\langle 12\bar{1}\rangle$	—

Dostępne wyniki doświadczalne dotyczą próby kanalikowej wykonanej dla wybranych orientacji sieci kryształu, por. rys. 6.36(c). Modelowanie procesu deformacji przeprowadzono dla początkowych orientacji określanych w literaturze (Kocks et al., 1998; Morawiec, 2004) jako „Cube”, „Goss”, „Brass”, „Copper” i „Strange”, por. tab. 6.4 oraz tab. 6.5.

Tablica 6.5: Figury biegunowe $\{111\}$ dla pięciu początkowych orientacji sieci. .

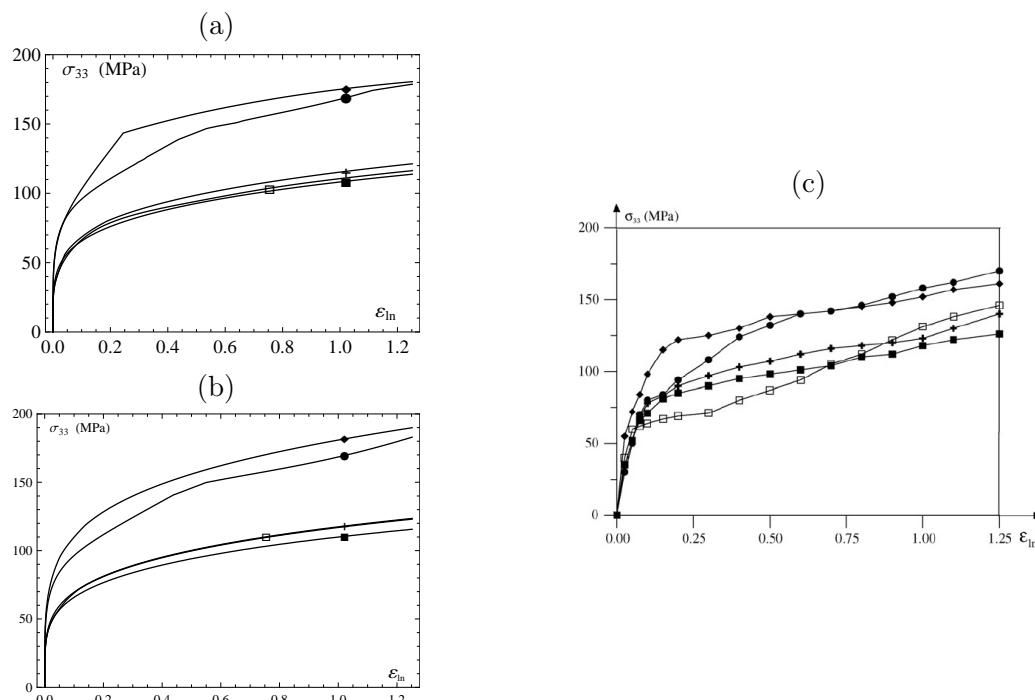


Przebieg procesu deformacji jest sterowany względem globalnego układu \bar{K}_S przy użyciu parametru obciążania λ . Natomiast odpowiedź materiału w naprężeniach jest określana względem odkształcenia $\varepsilon_{ln} = \ln(h_0/h)$ obliczanego na kierunku ściskania,

⁷Wg pracy (Kocks et al., 1998).

⁸Wg pracy (Darrieulat et al., 2007).

gdzie h_0 oznacza początkową wysokość próbki, a symbol h to wysokość aktualna. Symbol σ_{33} (oraz σ_{22}) występujący na rysunku 6.36 (rys. 6.41) oznacza makroskopowe naprężenie obliczane na kierunku ściskania ND (TD) względem globalnego układu \bar{K}_S .



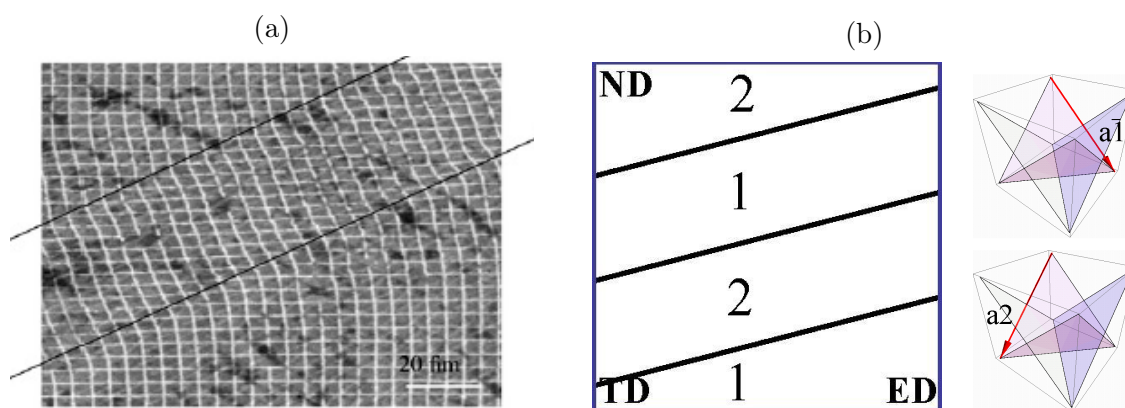
Rysunek 6.36: Obliczone krzywe naprężenia Cauchy’ego na kierunku ściskania σ_{33} przy rosnącym odkształceniu ϵ_{ln} bez podziału (a) i z podziałem (b) oraz wyniki doświadczalne (c) pięciu orientacji kryształu Al-1%Mn: (■) „Brass”, (+) „Goss”, (□) „Cube”, (◆) „Copper”, (●) „Strange”; wg pracy (Darrieulat et al., 2007).

Podczas testów eksperymentalnych, w początkowym etapie ściskania na powierzchniach próbki obserwowane są wyraźne ślady płaszczyzn poślizgu systemów aktywnych, por. wartości „pomierzone” wg (Darrieulat et al., 2007) w tab. 6.6. W celu porównania z wynikami eksperymentu, w modelowaniu wyznaczono nachylenie śladów płaszczyzn poślizgu na bocznej powierzchni (TD) próbki ściśniętej do odkształcenia $\epsilon_{ln} = 0.13$. Systemy aktywne wyznaczono poprzez modelowanie deformacji bez możliwości podziału ziarna, por. wartości „bez podziału” w tab. 6.6. Należy zaznaczyć, że przyjęta w modelowaniu początkowa orientacja „Strange” (tab. 6.4 i rys. 6.5), prawdopodobnie różni się od orientacji w testach eksperymentalnych (rys. 6.40(a)), stąd mogą wynikać różnice nachyleń płaszczyzn poślizgu obliczonych „bez podziału” ziarna i „pomierzonych” eksperymentalnie (tab. 6.6).

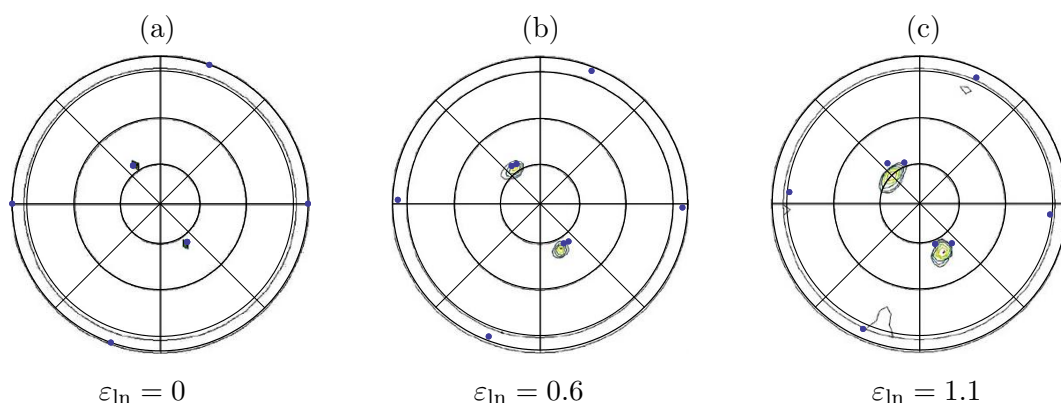
Tablica 6.6: Porównanie wartości „pomierzonych” w eksperymencie i obliczonych w modelowaniu „bez podziału” ziarna: nachylenie płaszczyzn poślizgu systemów aktywnych obserwowane na bocznej powierzchni próbki (ED-TD), przy odkształceniu $\epsilon_{ln} = 0.13$.

	„Cube”	„Goss”	„Brass”	„Copper”	„Strange”
„pomierzone” ⁹	+47°, -44°	+36°, -35°	+28°, -29°	+32°, -21°	+65°, -38°
„bez podziału”	±44.9°	±35.2°	±30°	+27.4°, -20.8°	+90.2°, -31.4°

W celu porównania obserwowanych eksperymentalnie pasm deformacji (rys. 6.37(a) i 6.39(a)) w przypadku orientacji „Copper” i „Strange”, wg pracy (Darrieulat et al., 2007), przedstawiono obliczony schemat laminatu widoczny na bocznej powierzchni ściśniętej próbki, (rys. 6.37(b)) i (rys. 6.39(b)). Schemat dwufazowego laminatu, jak również przyrosty ścinania w dwóch fazach, wyznaczono przy użyciu minimalizacji energii przyrostowej wg algorytmu obliczeniowego przedstawionego w podrozdziale 5.5. W przypadku orientacji „Copper” obliczony udział objętościowy wynosi $\eta = 0.5$, a płaszczyzna rozdziału to $\mathbf{m} = (111)$. W trakcie procesu deformacji płaszczyzna rozdziału \mathbf{m} ulega obrotom, więc na rysunku 6.37(b) widoczne jest nachylenie przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.28$. Dla orientacji „Strange” obliczony udział objętościowy wynosi $\eta = 0.8$, a płaszczyzna rozdziału to $\mathbf{m} = (011)$. Ślady płaszczyzn $\mathbf{m} = (011)$ zostały pokazane przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.76$, por. rys. 6.39(b).



Rysunek 6.37: Orientacja „Copper”: pasma deformacji widoczne na bocznej powierzchni próbki powstałe w wyniku ściskania w kanale przy $\varepsilon_{ln} = 0.28$ wg (Darrieulat et al., 2007) (a) oraz obliczony schemat laminatu ze śladami płaszczyzn podziału ziarna na bocznej powierzchni próbki i systemy poślizgu aktywne w podziarnach (nr 1 górne i nr 2 dolne), gdzie $\eta = 0.5$ i $\mathbf{m} = (111)$ (b).



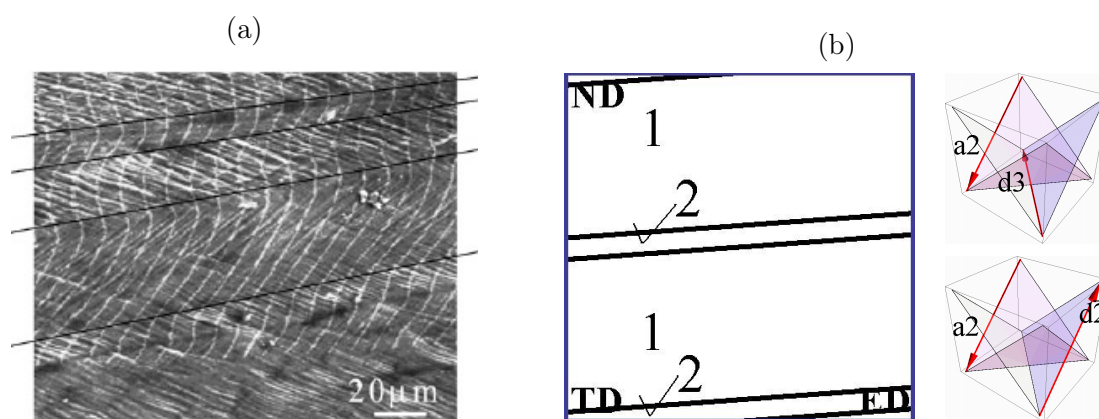
Rysunek 6.38: Porównanie wyników symulacji numerycznej i eksperymentu wg pracy (Darrieulat et al., 2007), na rzutach $\{111\}$ na płaszczyznę boczną (ED-ND), dla trzech wartości odkształcenia $\varepsilon_{ln} = 0$ (a), 0.6 (b), 1.1 (c), przy orientacji „Copper”.

W modelowanym procesie deformacji materiału o orientacji „Copper”, w chwili gdy nastąpił podział ziarna, w podziarnie 1 aktywowany został pojedynczy system $a\bar{1}$, a w

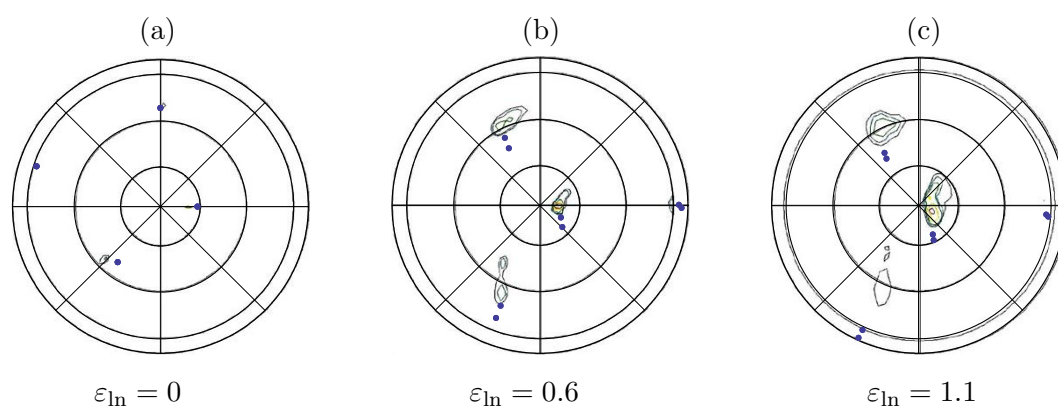
⁹Wyniki wg pracy (Darrieulat et al., 2007).

podziarnie 2 system $a2$, por. rys. 6.37(b). W przypadku orientacji „Strange”, w chwili wystąpienia podziału, w podziarnie 1 zostały aktywowane dwa systemy $(a2, d3)$, a w podziarnie 2 systemy $(a2, d\bar{2})$, por. rys. 6.39(b).

W trakcie deformacji materiału sieci krystalograficzne podziaren 1 i 2 ulegają obrotom. W przypadku początkowych orientacji „Copper” oraz „Strange” przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.6$ i $\varepsilon_{ln} = 1.1$ widoczne są różnice w orientacjach sieci podziaren, por. rys. 6.38(c) i 6.40(c).



Rysunek 6.39: Orientacja „Strange”: pasma deformacji widoczne na bocznej powierzchni próbki powstałe w trakcie próby kanalikowej przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.76$ wg pracy (Darrieulat et al., 2007) (a) oraz obliczony schemat laminatu ze śladami płaszczyzn rozdziału na bocznej powierzchni próbki i systemy ślizgu aktywne w podziarniach (nr 1 górne i nr 2 dolne), gdzie $\eta = 0.88$ i $\mathbf{m} = (011)$ (b).



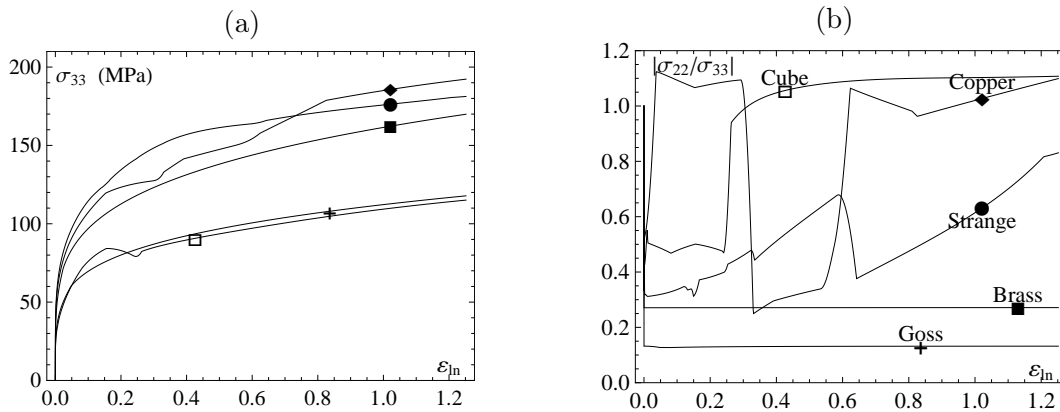
Rysunek 6.40: Porównanie wyników symulacji numerycznej i eksperymentu wg pracy (Darrieulat et al., 2007): rzuty $\{111\}$ na płaszczyznę boczną (ED-ND), dla trzech kolejnych orientacji sieci krysztalu przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0$ (a), 0.6 (b), 1.1 (c), przy orientacji „Strange”.

W modelowanym tu procesie obciążania obliczony, poprzez minimalizację energii przyrostowej, podział na podziarna zachodzi (zależnie od orientacji) w pierwszych krokach przyrostowej deformacji, gdy materiał znajduje się już w stanie uplastycznienia. Jednak dopiero przy większych wartościach odkształcenia, w wyniku niezależnych obrotów krystalograficznych sieci podziaren, pojawiają się obserwowalne różnice stanu deformacji pasm.

Numeryczna symulacja ściskania w płaskim stanie odkształcenia

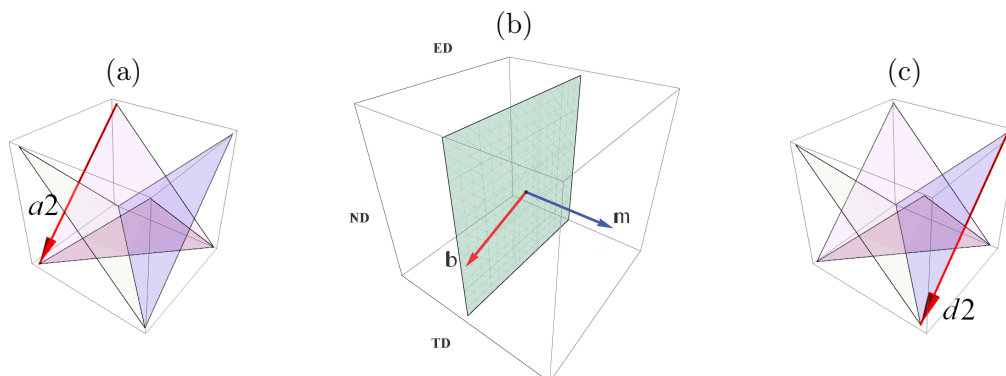
Przedstawione w niniejszym punkcie wyniki dotyczą modelowania testu ściskania w płaskim stanie odkształcenia z dopuszczeniem możliwości podziału ziarna. Proces deformacji polega na ściskaniu na kierunku ND z możliwością wydłużania materiału na kierunku podłużnym ED, przy braku ścinania w płaszczyznach ED-TD (1-2) oraz ED-ND (1-3).

Zamieszczone tu wyniki dotyczą modelowania procesu deformacji pojedynczego kryształu o początkowej orientacji „Cube”, por. tab. 6.4. Początkowa orientacja sieci jednorodnego kryształu jest określana przy użyciu macierzy obrotu $[Q^R]$ (6.13) o ustalonych kierunkach: ED \rightarrow [100], TD \rightarrow [010], ND \rightarrow [001]. W obliczeniach przyjęto moduły sprężystości Ni o wartościach $C_{11}^* = 246.4$ MPa, $C_{12}^* = 152.5$ MPa i $C_{44}^* = 122$ MPa. Wartości granicy plastyczności, modułów wzmocnienia, a także metodę selektywnej symetryzacji przyjęto zgodnie z danymi zawartymi w przykładzie modelowania próby kanalikowej (punkt 6.2.2).



Rysunek 6.41: Modelowanie ściskania w p.s.o.: obliczone krzywe naprężenia $|\sigma_{33}|$ na kierunku ściskania (a) oraz wartości stosunku naprężeń $|\sigma_{22}/\sigma_{33}|$ (b).

Stan deformacji i naprężenia w podziarnach oraz stopnie swobody laminatu (η , \mathbf{b} , \mathbf{m}) zostały wyznaczone przy użyciu metody minimalizacji energii przyrostowej analogicznie do modelowania procesu deformacji w próbie kanalikowej przedstawionej powyżej.



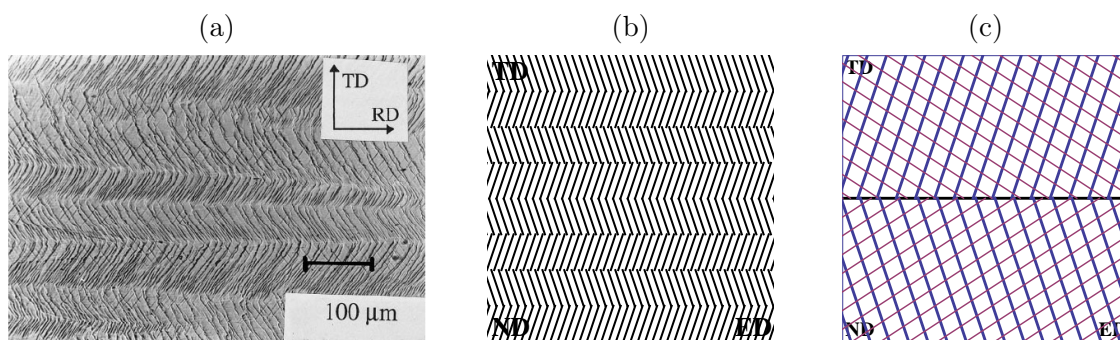
Rysunek 6.42: Ściskanie w p.s.o. o orientacji „Cube”: schemat podziału ziarna z orientacją wektora \mathbf{b} i płaszczyznę rozdzielającą \mathbf{m} (b) oraz aktywny system $a2$ w podziarnie 1 (a) i system $d2$ w podziarnie 2 (c), w chwili podziału przy $\epsilon_{in} = 10^{-4}$.

Naprężenie σ_{22} na kierunku poprzecznym TD zależy od początkowej orientacji sieci

jednorodnego kryształu. Zauważalne są duże wartości stosunku $|\sigma_{22}/\sigma_{33}|$ zwłaszcza w przypadku orientacji „Cube” i „Copper”, por. rys. 6.41.

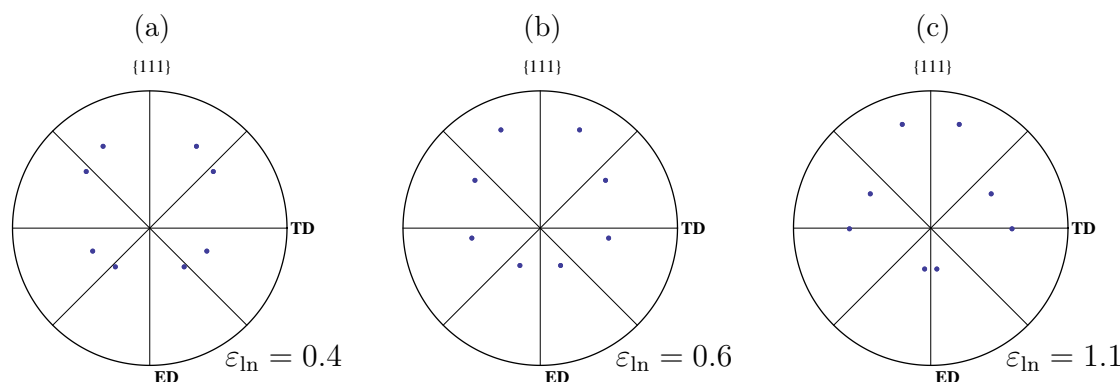
Obliczony udział objętościowy podziaren wynosi $\eta = 0.5$. Płaszczyzna rozdziału podziaren $\mathbf{m} = [0\ 1\ 0]$ jest równoległa do płaszczyzny ED-ND i nie zmienia orientacji w trakcie deformacji materiału. Wektor \mathbf{b} jest wyznaczany przyrostowo i aktualizowany w każdym kroku deformacji. W trakcie procesu ściskania wektor \mathbf{b} leży w płaszczyźnie \mathbf{m} i w końcowym korku deformacji osiąga wartość $\mathbf{b}_{(\varepsilon_{ln}=1.25)} = [1.64\ 0\ -0.59]$.

Podział ziarna następuje przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 10^{-4}$, w związku z tym w pierwszym podziarnie aktywowany jest system $a2$, a w drugim podziarnie system $d2$, por. rys. 6.42(a) i (c). W wyniku dalszej deformacji, w podziarnach pojawiają się dodatkowe systemy poślizgu, por. rys. 6.43(c), tak że płaszczyzny ścinania systemów aktywnych to (a, c) w pierwszym podziarnie i (d, b) w drugim podziarnie. Obserwowane na ściskanej powierzchni próbki płaszczyzny dominujących systemów poślizgu (rys. 6.43(b)) układają się w charakterystyczny wzór (rys. 6.43(a) wg pracy (Basson & Driver, 2000)).



Rysunek 6.43: Ściskanie monokryształu Ni o orientacji „Cube”: zdjęcie pasm deformacji wg pracy (Basson & Driver, 2000) (a), ślady dominujących poślizgów w pasmach deformacji widoczne na ściskanej powierzchni przy odkształceniu $\varepsilon_{ln} = 0.83$ (b) oraz ślady systemów dominujących (grube niebieskie linie) i dodatkowych (cienkie czerwone linie) (c), w górnym paśmie ślady płaszczyzn (d, b) , w dolnym paśmie (a, c) .

Obrót sieci podziaren obserwowany na rzutach $\{111\}$ jest symetryczny względem płaszczyzny rozdziału \mathbf{m} , por. rys. 6.44 i rys. 6.42(b).



Rysunek 6.44: Zmiany orientacji sieci krystalograficznej podziaren widoczne na rzutach $\{111\}$ na płaszczyznę TD-ED, przy odkształceniu $\varepsilon_{ln}=0.4$ (a), 0.6 (b), 1.1 (c).

Rozdział 7

Zastosowanie do modelowania polikryształów metali

7.1 Schemat obliczeniowy dla polikryształu

Modelowany polikryształ zbudowany jest z dużej liczby, zazwyczaj dowolnie zorientowanych ziaren. Każdemu ziarnu polikryształu przyporządkowany jest lokalny układ współrzędnych K_C trwale związany z początkową orientacją sieci krystalograficznej. Za pomocą kątów Eulera dla każdego ziarna zadana jest początkowa orientacja lokalnego układu K_C , względem układu globalnego \bar{K}_S związanego z kierunkami próbki. Sterowanie procesem obciążania polikryształu odbywa się w globalnym układzie \bar{K}_S .

Początkowo przypadkowa orientacja sieci kryształów jest wyznaczana przy użyciu wbudowanego w program Mathematica generatora liczb pseudolosowych lub poprzez ustalenie równomiernego podziału przestrzeni orientacji. Każdy kryształ ma przypisaną inną początkową orientację względem globalnego układu współrzędnych \bar{K}_S . Początkowe orientacje kryształów są określane kątami Eulera, które przyjmują wartości z przedziałów $\varphi_1 \in (P_{\varphi_1}, K_{\varphi_1})$, $\Phi \in (P_{\Phi}, K_{\Phi})$, $\varphi_2 \in (P_{\varphi_2}, K_{\varphi_2})$. Przedziały wartości kątów Eulera zależą od symetrii sieci krystalograficznej. Wykorzystując symetrię sieci typu r.s.c. można znacznie ograniczyć przedziały wartości kątów, z zachowaniem ostrożności, tak aby uwzględnić wszystkie orientacje, por. (Bunge, 1982), (Dłużewski, 1991).

W niniejszej pracy stosowane są dwie metody dobierania wartości kątów Eulera. Pierwsza z metod zakłada podział każdego z przedziałów $(P_{\varphi_1}, K_{\varphi_1})$, (P_{Φ}, K_{Φ}) , $(P_{\varphi_2}, K_{\varphi_2})$ na równe odcinki i dobieranie wartości kątów, które tworzą regularną siatkę punktów w przestrzeni orientacji. Druga metoda polega na pseudolosowym generowaniu wartości trzech kątów Eulera, które utworzą losową siatkę punktów orientacji. W pierwszej metodzie, trzy przedziały wartości kątów $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ są podzielone odpowiednio na $(N_{\varphi_1}, N_{\Phi}, N_{\varphi_2})$ odcinków równej długości. W metodzie wykorzystującej generator liczb pseudolosowych (funkcja `Random` w tab. 7.1), wartości kątów są losowane z powyższych przedziałów. W obydwu powyższych metodach modelowany polikryształ jest zbiorem $lz = N_{\varphi_1} N_{\Phi} N_{\varphi_2}$ różnie zorientowanych ziaren. Do ziarna o numerze $k = 1, \dots, lz$ przypisane są trzy wartości kątów Eulera $(\varphi_{1k}, \Phi_k, \varphi_{2k})$ według algorytmu przedstawionego w tab 7.1.

Macierze obrotu $[Q_{ij}^R]_k$ (5.15), dla każdego kryształu k , są niezależnie obliczane z wykorzystaniem wygenerowanych wartości kątów Eulera $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)_k$.

Tablica 7.1: Algorytm generowania wartości kątów Eulera $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)_k$.

Generowanie wartości kątów Eulera
<p>Start $k = 1$ (dla kryształu nr k) oraz $i = l = m = 0$, Wykonaj iterację i jeśli $i < N_{\varphi_1}$, Wykonaj iterację l jeśli $l < N_{\Phi}$, Wykonaj iterację m jeśli $m < N_{\varphi_2}$, $\Delta\varphi_1 = (K_{\varphi_1} - P_{\varphi_1})/N_{\varphi_1}$, $\Delta\Phi = (K_{\Phi} - P_{\Phi})/N_{\Phi}$, $\Delta\varphi_2 = (K_{\varphi_2} - P_{\varphi_2})/N_{\varphi_2}$ Wartości kątów mogą być generowane w regularnych odstępach $\varphi_{1k} = \Delta\varphi_1 (1/2 + m)$, $\Phi_k = \Delta\Phi (1/2 + l)$, $\varphi_{2k} = \Delta\varphi_2 (1/2 + i)$ lub losowo¹⁰ $\varphi_{1k} = \text{Random}(P_{\varphi_1}, K_{\varphi_1})$, $\Phi_k = \text{Random}(P_{\Phi}, K_{\Phi})$, $\varphi_{2k} = \text{Random}(P_{\varphi_2}, K_{\varphi_2})$ $m = m + 1$ oraz $k = k + 1 \uparrow$, $l = l + 1 \uparrow$, $i = i + 1 \uparrow$,</p>

Modelowanie procesu deformacji polikryształu odbywa się w kolejnych krokach podstawowej pętli obciążania (tab. 7.2). Na każdym kroku zadawany jest przyrost deformacji polikryształu względem układu globalnego, a następnie obliczany stan naprężenia przypadający na koniec kroku. W przypadku zastosowanego tu modelu Taylora (Taylor, 1938a) wszystkie ziarna ulegają identycznej deformacji całkowitej. Zadawana deformacja jest transformowana z układu globalnego dla polikryształu do lokalnego układu pojedynczego ziarna, następnie w każdym ziarnie obliczany jest stan naprężenia przypadający na koniec przyrostowego kroku obciążania. Algorytm przyrostowej deformacji polikryształu zawiera pętlę, w której wyznaczana jest odpowiedź w postaci naprężeń dla każdego kryształu k względem układu lokalnego (2a w tab. 7.2). Następnie, na podstawie wyznaczonych wartości naprężenia w kryształach, obliczana jest wartość makroskopowego naprężenia polikryształu (2b w tab. 7.2).

Minimalizacja przyrostu energii jest przeprowadzana na poziomie pojedynczego kryształu, przy użyciu metody rozszerzonych mnożników Lagrange'a (podrozdział 5.2). W przypadku modelowania procesu dużych deformacji z pełnymi więzami kinematycznymi odpowiedź pojedynczego kryształu jest obliczana przy zastosowaniu algorytmu lagrange'owskiego (punkt 5.3.1). Podstawowa pętla obliczeniowa przyrostowej deformacji polikryształu została przedstawiona w tablicy 7.2.

W przypadku modelowania deformacji w zakresie małych odkształceń bez uwzględnienia obrotów sieci, struktura algorytmu obliczeniowego jest analogiczna do struktury algorytmu dużych deformacji (tab. 7.2). Proces obciążania polikryształu jest realizowany przy użyciu odkształcenia $[\bar{\varepsilon}]$ względem układu globalnego, a naprężenie $[\bar{\sigma}]$ jest obliczane jako wartość uśredniona z lokalnych naprężeń $[\sigma]$ w poszczególnych ziarnach. Naprężenia lokalne $[\sigma]$ w ziarnach są obliczane z wykorzystaniem minimalizacji energii przyrostowej (wg algorytmu w podrozdziale 2.9).

¹⁰Random oznacza zastosowanie funkcji programu Mathematica, która generuje pseudolosowe wartości rzeczywiste.

Tablica 7.2: Algorytm podstawowej pętli przyrostowej deformacji polikryształu.

Podstawowa pętla deformacji polikryształu - duże deformacje	
0.	<p>Wielkości początkowe i stałe w całym procesie: $\bar{\mathbf{F}}(t)$ (deformacja polikryształu) oraz stałe: $[\mathbf{C}^*], \mathbf{m}^K, \mathbf{n}^K, \tau_0, h_0, \dots$ Generowanie kątów $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)_k$ oraz obliczanie $[\mathbf{Q}^R]_k = [\mathbf{Q}^R](\varphi_{1k}, \Phi_k, \varphi_{2k})_{(9 \times 9)}$</p>
1.	<p>Inicjalizacja wartości początkowych dla kroku $n = 0$, gdy $t_{n=0} = 0$: $\bar{\mathbf{S}}_{n=0} = \bar{\boldsymbol{\tau}}_{n=0} = \bar{\mathbf{T}}_{n=0}^* = \mathbf{0}_{(3 \times 3)} \quad \bar{\mathbf{F}}_{n=0} = \bar{\mathbf{F}}_{n=0}^P = \bar{\mathbf{F}}_{n=0}^* = \mathbf{1}_{(3 \times 3)}$ (polikryształu) Inicjalizacja pozostałych wielkości dla poszczególnych kryształów k.</p>
2.	<p>Start głównej pętli deformacji przy $n = 0$ oraz kolejne kroki $n + 1$: JEŻELI $\lambda_{n+1} \leq \lambda_{\text{end}}$ TO OBLICZ: $\bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}(\lambda_{n+1})$, gdzie $\lambda_{n+1} = \lambda_n + \Delta\lambda_n$, ($\Delta\lambda_n$ może być modyfikowany)</p> <p>2a. Start ($k = 1$) pętli przebiegającej po wszystkich kryształach k: JEŻELI $k \leq lz$ TO OBLICZ: $\mathbf{F}_{n+1k} = \text{V9toM}([F_{ij}]_{n+1k}) \quad [F_{ij}]_{n+1k} = [\mathbf{Q}^R]_k [\bar{F}_{ij}]_{n+1} \quad [\bar{F}_{ij}]_{n+1} = \text{MtoV9}(\bar{\mathbf{F}}_{n+1})$ Dla danych wejściowych pojedynczego kryształu k: $(\mathbf{F}_{n+1}, \mathbf{F}_n, \mathbf{F}_n^*, \mathbf{F}_n^P, [\gamma^K]_n, \mathcal{A}_n, [q^K]_n, [g^{KL}]_n)_k$ $\Rightarrow \boxed{\text{ESP}} \Rightarrow$ $([\Delta\gamma^K], [\gamma^K], \mathcal{A}, \mathbf{F}^*, \mathbf{F}^P, \mathbf{T}^*, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{S}, [q^K], [g^{KL}], [f^K])_{n+1k}$ Obrót do układu globalnego: $\bar{\mathbf{F}}_{n+1k}^*, \bar{\mathbf{F}}_{n+1k}^P, \bar{\boldsymbol{\tau}}_{n+1k}, \bar{\mathbf{S}}_{n+1k}$ Powiększ $k = k + 1$ numer kryształu i idź do punktu nr 2a. \uparrow PRZECIWNIE: idź do punktu nr 2b. \downarrow</p> <p>2b. Aktualizacja wartości makroskopowych polikryształu: $\bar{\mathbf{F}}_{n+1}^* = \frac{\Delta Q}{Q} \sum_{k=1}^{lz} \bar{\mathbf{F}}_{n+1k}^* \sin(\Phi_k) \quad \bar{\mathbf{F}}_{n+1}^P = \frac{\Delta Q}{Q} \sum_{k=1}^{lz} \bar{\mathbf{F}}_{n+1k}^P \sin(\Phi_k)$ $\bar{\boldsymbol{\tau}}_{n+1} = \frac{\Delta Q}{Q} \sum_{k=1}^{lz} \bar{\boldsymbol{\tau}}_{n+1k}^* \sin(\Phi_k) \quad \bar{\mathbf{S}}_{n+1} = \frac{\Delta Q}{Q} \sum_{k=1}^{lz} \bar{\mathbf{S}}_{n+1k} \sin(\Phi_k)$ Powiększ nr kroku $n = n + 1$, następnie idź do punktu nr 2. \uparrow</p> <p>PRZECIWNIE: przejdź do punktu nr 4. \downarrow</p>
4.	Zatrzymanie głównej pętli deformacji.

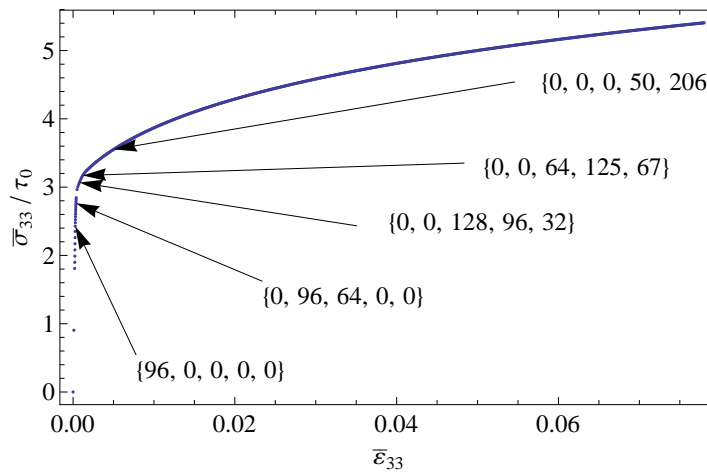
7.2 Wyniki numerycznej symulacji w zakresie małych odkształceń

Ziarna tworzące modelowany polikryształ posiadają moduły sprężystości kryształu Cu o identycznych wartościach $C_{11}=170$ GPa, $C_{44}=75$ GPa, $C_{12}=123$ GPa. Dla każdego kryształu przyjęte są również identyczne moduły \mathcal{K}^{KL} (2.58) z potęgowym charakterem wzmocnienia (2.64), gdzie $h_0 = 0.18$ GPa, parametr wzmocnienia utajonego $q = 1.4$, stały wykładnik $n = 0.16$ oraz granica plastyczności wynosi $\tau_0 = 16$ MPa.

7.2.1 Jednoosiowe rozciąganie polikryształu

Rozpatrujemy najpierw modelowanie małych sprężysto-plastycznych odkształceń polikryształu, nie uwzględniając zmian obrotów sieci poszczególnych kryształów w trakcie procesu odkształcania i wykorzystując metodę uśredniania Taylora.

Początkowe orientacje sieci poszczególnych kryształów, przyjęte do dalszych obliczeń, są określane na podstawie wartości kątów Eulera z przedziałów: $(P_{\varphi_1} = 0, K_{\varphi_1} = \pi)$, $(P_{\Phi} = 0, K_{\Phi} = \pi)$, $(P_{\varphi_2} = 0, K_{\varphi_2} = \pi/2)$. Przedziały wartości kątów Eulera są podzielone na regularne odcinki ($N_{\varphi_1} = 8, N_{\Phi} = 8, N_{\varphi_2} = 4$) wg algorytmu w tablicy 7.1.



Rysunek 7.1: Przebieg naprężenia $\bar{\sigma}_{33}$ względem układu globalnego. W wybranych punktach deformacji podano liczby ziaren $\{l_{z|A|=K}; K = 1, \dots, 5\}$, w których aktywnych jest od 1 do 5 systemów poślizgu.

Stały przyrost parametru obciążania, który wynosi $\Delta\lambda = 10^{-4}$, odpowiada przyrostowi odkształcenia $\Delta\bar{\epsilon}_{33}$. Liczba (n) kroków obciążania to $n_k = 800$, a końcowa wartość odkształcenia na kierunku rozciągania wynosi $\bar{\epsilon}_{33} = 0.08$.

Na wykresie naprężenia na kierunku rozciągania $\bar{\epsilon}_3$ w układzie globalnym, por. rys. 7.1, dla pięciu wybranych wartości naprężenia $\bar{\sigma}_{33}/\tau_0$ zaznaczonych strzałkami, podano pięć cyfr oznaczających liczbę ziaren $l_{z|A|=K}$ o aktywnych odpowiednio, $K = 1, 2, 3, 4, 5$ systemach poślizgu. Można zauważyć, że od odkształcenia o wartości około $\bar{\epsilon}_{33} = 0.005$ w większości ziaren (w $l_{z|A|=5}=206$ z $l_{z|=256}$) jest aktywnych pięć systemów poślizgu.

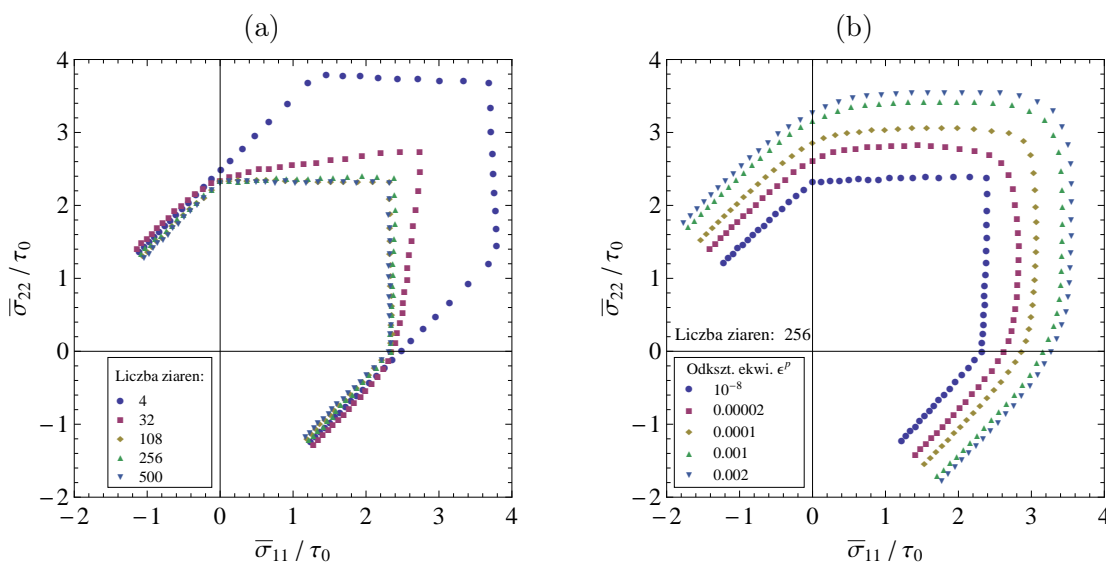
7.2.2 Powierzchnie plastyczności polikryształu

W ramach modelu małych sprężysto-plastycznych odkształceń odtworzono powierzchnie plastyczności polikryształu w płaszczyźnie naprężeń $\bar{\sigma}_{11}-\bar{\sigma}_{22}$ układu globalnego. Modelowanie przeprowadzono bez uwzględnienia obrotów sieci krystalograficznej, jak w punkcie 7.2.1. W płaszczyźnie $\bar{\sigma}_{11}-\bar{\sigma}_{22}$ ustalono 61 równomiernie rozłożonych prostoliniowych kierunków obciążania polikryształu i na tych kierunkach wyznaczono punkty odpowiadające pożądanym wartościom odkształcenia plastycznego. Porównano odtworzone powierzchnie plastyczności polikryształu przy rosnącej liczbie ziaren dla końca etapu sprężystego, por. rys. 7.2(a). Na rysunku 7.2(b) przedstawiono powierzchnie pla-

styczności wyznaczone przy ustalonej liczbie ziaren i rosnącej wartości plastycznego odkształcenia.

Porównanie powierzchni plastyczności polikryształów (rys. 7.2(a)) dotyczy pięciu symulacji numerycznych, które przeprowadzono niezależnie, przy każdorazowym zwiększaniu liczby ziaren l_z . Obliczenia przeprowadzono dla polikryształów złożonych z $4 \div 500$ ziaren. Punkty wyznaczające powierzchnie plastyczności obliczono dla końca etapu sprężystego w polikryształach.

Każda z powierzchni plastyczności przedstawionych na rysunku 7.2(b) została wyznaczona w polikryształach zawierającym 256 ziaren, dla różnych wartości odkształcenia plastycznego. Miarą tych wartości jest plastyczne odkształcenie ekwiwalentne $\epsilon^P = \sqrt{2/3}|\epsilon^P|$ (parametr Odquista) polikryształu. W każdym z 61 kierunków obciążania obliczono pięć punktów $(\bar{\sigma}_{11}, \bar{\sigma}_{22})$, gdzie parametr Odquista osiąga wartość ϵ^P : 10^{-8} , 2×10^{-5} , 10^{-4} , 10^{-3} , 2×10^{-3} , por. rys. 7.2(b).



Rysunek 7.2: Kształt powierzchni plastyczności polikryształu przy rosnącej liczbie ziaren $4 \div 500$ (a) oraz przy 256 ziarnach i rosnących wartościach plastycznego odkształcenia ekwiwalentnego ϵ^P (b).

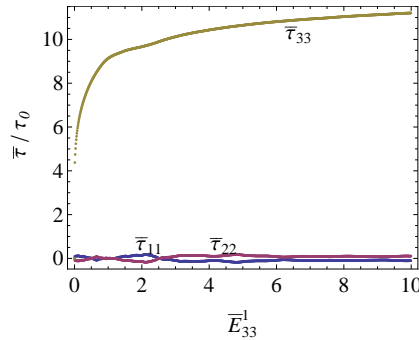
Przy odtwarzaniu powierzchni plastyczności polikryształu przyjęto przedział zmienności wartości kątów Eulera oraz regularną siatkę punktów w przestrzeni orientacji (czyli wstępną orientację kryształów) jak w punkcie 7.2.1 powyżej.

7.3 Wyniki numerycznej symulacji w zakresie dużych deformacji – rozwój tekstury

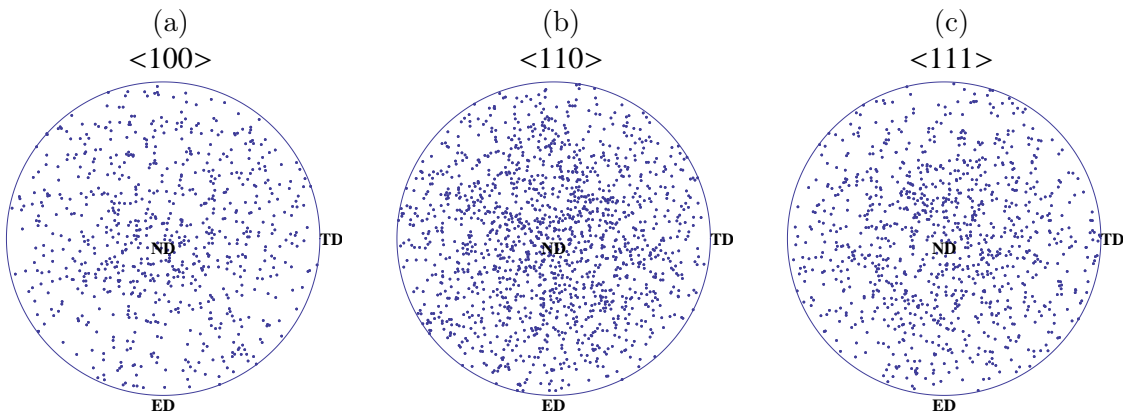
Początkowe orientacje sieci kryształów, względem kierunku obciążania, mają przybliżyć rzeczywisty charakter rozkładu orientacji w polikryształach. Zatem, przestrzeń orientacji została podzielona w sposób nieregularny. Wartości kątów Eulera kolejnych kryształów są dobierane z wykorzystaniem generatora liczb pseudolosowych. W niezależnym losowaniu dla kryształu k wyznaczone są trzy liczby z przedziałów $\varphi_1 \in (0, \pi)$, $\Phi \in (0, \pi)$,

$\varphi_2 \in (0, \pi/2)$. Modelowane tu polikryształy są zbiorami 256 ziaren. Początkowe orientacje sieci ziaren polikryształu pokazano na trzech figurach biegunowych przedstawiających rzuty zbiorów kierunków $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ i $\langle 111 \rangle$, rys. 7.4. W modelowaniu przyjęto wartości modułów sprężystości i plastyczności jak w podrozdziale 7.2 oraz zastosowano metodę selektywnej symetryzacji (3.13) z parametrem $r = 1/2$.

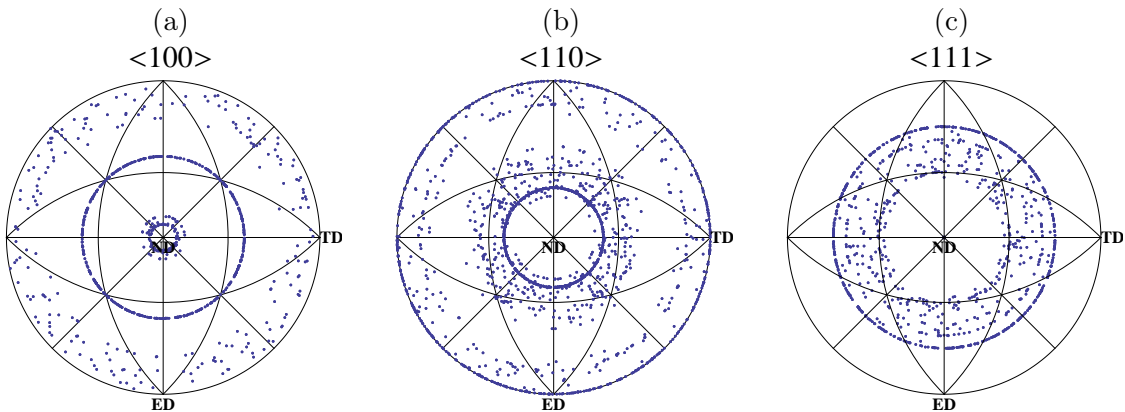
Rozciąganie polikryształu na kierunku 3



Rysunek 7.3: Wykres naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}$ polikryształu złożonego z 256 ziaren.



Rysunek 7.4: Początkowe orientacje 256 ziaren widoczne na rzutach kierunków $\langle 100 \rangle$ (a), $\langle 110 \rangle$ (b) i $\langle 111 \rangle$ (c) na płaszczyźnie TD-ED.



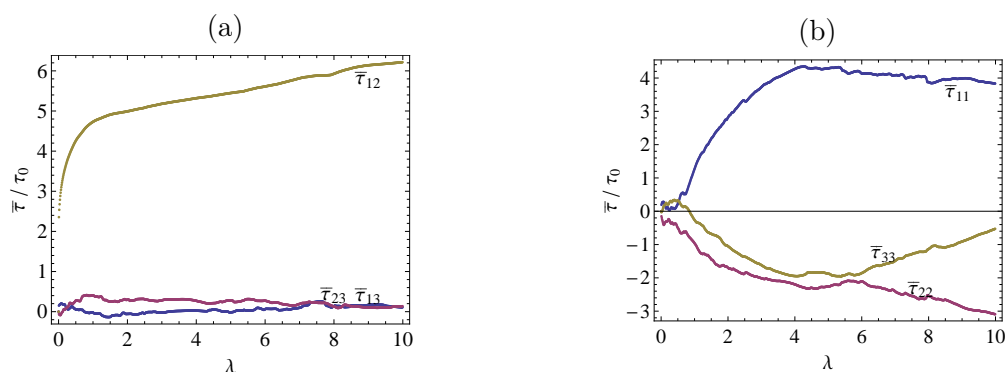
Rysunek 7.5: Wydłużanie polikryształu w kierunku 3: orientacje $\langle 100 \rangle$ (a), $\langle 110 \rangle$ (b) i $\langle 111 \rangle$ (c), 256 ziaren na końcu procesu deformacji, przy $\bar{E}_{33}^{(1)} = 10$.

Wydłużanie polikryształu na kierunku $\bar{\mathbf{e}}_3$ globalnego układu współrzędnych \bar{K}_S jest modelowane przy użyciu parametru obciążania $\lambda = \bar{F}_{33} - 1$ i gradientu deformacji $[\bar{\mathbf{F}}](\lambda)$ względem układu \bar{K}_S . W celu sprawdzenia poprawności zastosowanych metod i efektywności działania algorytmów proces wydłużania przeprowadzono do osiągnięcia dużej wartości odkształcenia inżynierskiego $\bar{E}_{33}^{(1)} = 10$, mierzonego względem układu globalnego \bar{K}_S .

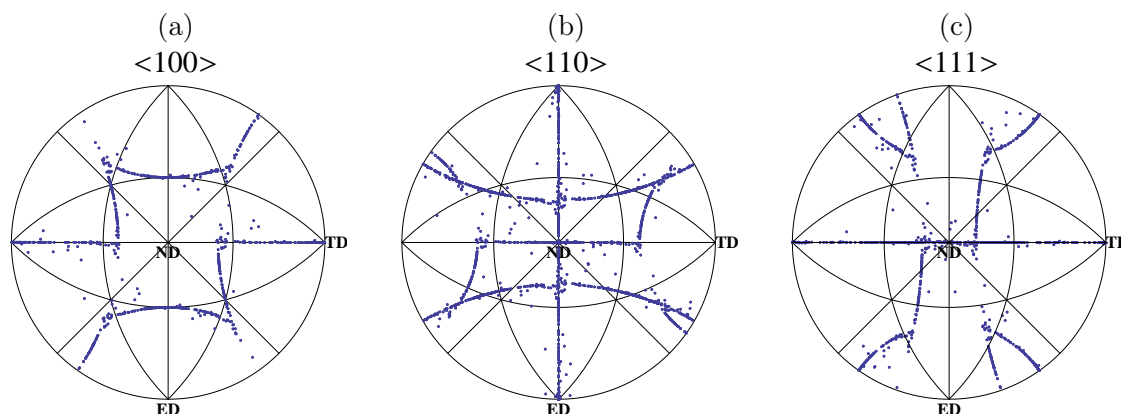
Przebieg wartości naprężenia $\bar{\tau}_{33}$ na kierunku rozciągania jest zgodny z oczekiwaniami, por. rys. 7.3. Wartości pozostałych składowych tensora $\bar{\tau}$ naprężenia Kirchhoffa są małe w stosunku do wartości $\bar{\tau}_{33}$.

W trakcie procesu deformacji sieci poszczególnych kryształów ulegają obrotom. Z początkowo przypadkowego rozłożenia orientacji kierunków $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ i $\langle 111 \rangle$ (rys. 7.4) wyłaniają się charakterystyczne tekstury, por. rys. 7.5, widoczne w przekroju (TD-ED) prostopadłym do osi rozciągania ND ($\bar{\mathbf{e}}_3$).

Proste ścinanie w płaszczyźnie 1-2 oraz 1-3

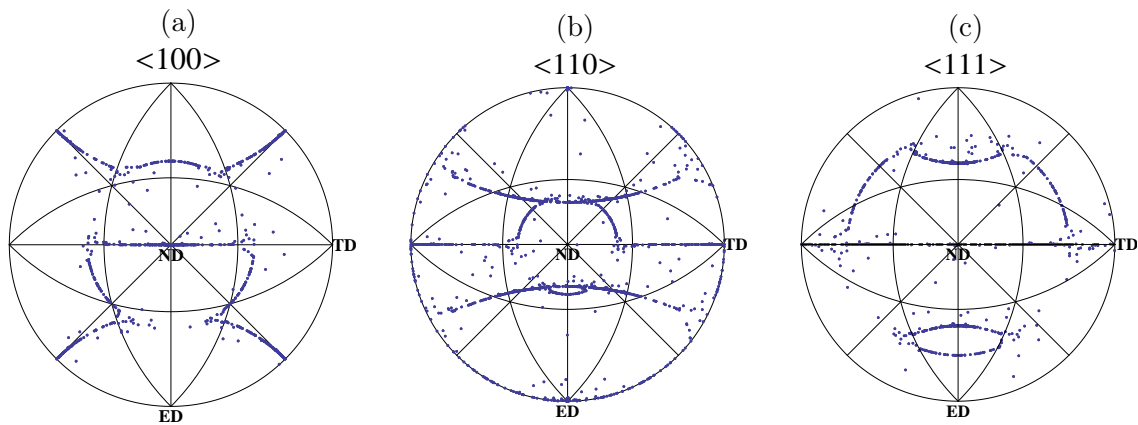


Rysunek 7.6: Wykres naprężenia Kirchhoffa $\bar{\tau}$ polikryształu złożonego z 256 ziaren, przy prostym ścinaniu w płaszczyźnie 1-2 (parametr $\lambda = \bar{F}_{12}$).



Rysunek 7.7: Proste ścinanie w płaszczyźnie 1-2: końcowe orientacje 256 ziaren widoczne na rzutach kierunków $\langle 100 \rangle$ (a), $\langle 110 \rangle$ (b) i $\langle 111 \rangle$ (c).

Uzyskany przebieg naprężenia w modelowaniu prostego ścinania polikryształu w płaszczyznach 1-2 (ED-TD) oraz 1-3 (ED-ND) ma podobny charakter, więc zamieszczono tu tylko wykresy naprężenia obliczonego przy ścinaniu w płaszczyźnie 1-2 (rys. 7.6).



Rysunek 7.8: Proste ścinanie w płaszczyźnie 1-3: końcowe orientacje 256 ziaren widoczne na rzutach kierunków $\langle 100 \rangle$ (a), $\langle 110 \rangle$ (b) i $\langle 111 \rangle$ (c).

Tekstury otrzymane w przypadku rozciągania (rys. 7.5) przy końcowej wartości odkształcenia $\bar{E}_{33}^{(1)} = 10$ oraz tekstury w dwóch płaszczyznach prostego ścinania (rys. 7.7 i 7.8) przy odkształceniu $\bar{F}_{12} = \bar{F}_{13} = 10$, przyjmują charakterystyczną dla modelu uśredniania Taylora postać o dużym kontraście.

Zamieszczone w niniejszym punkcie wyniki numerycznego modelowania procesu deformacji polikryształów zostały podane w celu zilustrowania efektywności zbudowanych algorytmów wykorzystujących minimalizację energii przyrostowej wykonywaną na poziomie pojedynczego kryształu.

Rozdział 8

Podsumowanie i wnioski końcowe

W modelowaniu sprężysto-plastycznych właściwości pojedynczego kryształu zastosowano niezależne od skali czasu sformułowanie klasycznej teorii plastyczności z wieloma systemami poślizgu w zakresie dużych deformacji. Charakterystyczna dla sieci krystalograficznej metali mnogość systemów poślizgu wraz z jednoczesnym występowaniem wzmocnienia utajonego powoduje trudność polegającą na niejednoznaczności wyboru tych systemów, które aktualnie są aktywne. Modelowanie w zakresie dużych deformacji powoduje dodatkowe utrudnienie spowodowane rozwijającymi się obrotami sieci, które mają istotny wpływ na odpowiedź materiału.

W niniejszej rozprawie została przedstawiona propozycja podejścia umożliwiającego przewyższanie trudności w wyborze nieznanego zbioru aktywnych systemów poślizgu, który ulega zmianom podczas procesu deformacji. To podejście do modelowania skończonych sprężysto-plastycznych deformacji kryształów metali wykorzystuje wprost metodę minimalizacji energii przyrostowej dostarczanej do kryształu. Quasi-statyczne procesy deformacji są modelowane na poziomie reprezentatywnego elementu materiału przy założeniu stałej temperatury, pominięciu efektów dynamicznych oraz lepkich. Zastosowana metoda umożliwia dowolny sposób sterowania procesem, także przy pomocy zewnętrznych naprężeń, jednakże tutaj ograniczono modelowanie do sterowania kinematycznego wymuszeniami wolno zmieniającymi się w czasie. Przyrost energii jest wyznaczany z dokładnością do członów drugiego rzędu względem przyrostu czasu. Wyznaczenie minimum przyrostu energii daje poszukiwane rozwiązanie, eliminując rozwiązania energetycznie mniej korzystne, jeżeli występuje niejednoznaczność rozwiązania. Wykorzystana tutaj metoda minimalizacji energii przyrostowej wywodzi się z energetycznego kryterium stabilności procesu deformacji. Analiza numerycznych wyników oraz porównań ze znanymi z literatury wynikami doświadczalnymi potwierdza poprawność rozwiązań oraz uzasadnia zastosowanie metody minimalizacji energii przyrostowej.

Metoda minimalizacji energii przyrostowej wymaga stosowania pewnych ograniczeń nakładanych na prawa konstytutywne modelu deformacji materiału. Zostało pokazane, że z tych ograniczeń wynika wymóg symetrii macierzy modułów interakcji aktywnych systemów poślizgu plastycznego. Wymóg symetrii wprowadza dodatkowe geometryczne człony, wynikające z obrotów sieci, bezpośrednio do prawa wzmocnienia kryształu, więc modyfikuje odpowiedź materiału obserwowaną w naprężeniach. Pokazano, że dotychczas proponowane w literaturze metody symetryzacji, t.j. metoda H.S., P.A.N. i H.Y., zastosowane w modelu do numerycznych symulacji rozciągania kryształu prowadzą do nieobserwowanych doświadczalnie rozwiązań. Wyniki numeryczne otrzymane przy za-

stosowaniu tych metod wykazują nadmierne wzmocnienie albo osłabienie wynikające z efektów geometrycznych. Analiza członów wprowadzanych przez metody H.S. i H.Y. do prawa wzmocnienia wykazała, że dodatkowo wprowadzana jest niepotrzebna modyfikacja symetrycznej części macierzy modułów interakcji. W celu poprawnej symetryzacji zaproponowano metodę symetryzacji selektywnej z parametrem r , która nie modyfikuje symetrycznych członów macierzy. Oryginalnym elementem w tej metodzie jest symetryzacja macierzy wykonywana selektywnie z ograniczeniem tylko do składowych odpowiadających aktywnym systemom poślizgu, co odróżnia ją od metody P.A.N.. Wykazano, że taka selektywna symetryzacja prowadzi do bardziej poprawnych wyników w stosunku do dotychczasowych metod symetryzacji proponowanych w literaturze.

Interakcje między dyslokacjami pierwotnych i wtórnych systemów utrudniają jednoczesne uruchomienie kilku systemów poślizgu w jednym regionie kryształu, powodując separację systemów na obszary pojedynczego poślizgu. Natomiast w ramach klasycznego modelu plastyczności kryształu występuje jedynie jednorodna deformacja obejmująca poślizg wielokrotny. W rozprawie wykorzystano model, który zawiera dodatkowe stopnie swobody deformacji, tak że materiał ma możliwość rozwoju złożonych pól lokalnej deformacji w formie laminatu pierwszego rzędu. Proponowane podejście wprowadza model materiału z dodatkowymi stopniami swobody, które są wyznaczone przy użyciu metody minimalizacji energii przyrostowej. W trakcie procesu deformacji kryształ może zostać podzielony na dwa podziarna z niezależnie wyznaczanymi zbiorami systemów aktywnych. Metoda minimalizacji energii przyrostowej umożliwia modelowanie deformacji początkowo jednorodnego ziarna z możliwością jego spontanicznego podziału rozumianego jako rozwój mikrostruktury. Podział wystąpi w chwili, gdy energia przyrostowa osiągnie minimum dla ziarna podzielonego. W niniejszej pracy rozważany jest przypadek laminatu pierwszego rzędu, przy czym podczas całego procesu deformacji podział ziarna może nastąpić tylko raz, bez późniejszej ewolucji stopni swobody laminatu. Zmiany wartości udziału objętościowego i orientacji płaszczyzny rozdziału podczas deformacji materiału nie są uwzględnione. Możliwe jest rozszerzenie modelowania na zmienną wartość udziału objętościowego, dalszy podział podziaren np. w postaci laminatów zagnieżdżonych, uwzględnienie energii granic rozdziału, itd., co będzie przedmiotem dalszych badań, lecz nie wchodziło w zakres rozprawy.

W celu zastosowania metody minimalizacji energii przyrostowej do numerycznego modelowania kinematycznie sterowanych procesów deformacji kryształów, opracowano oryginalny algorytm obliczeniowy w trzech różnych wersjach, a następnie zaimplementowano w programie Mathematica (www.wolfram.com). Algorytm bazuje wprost na metodzie minimalizacji energii przyrostowej, a jego kluczowym punktem jest procedura wyznaczania minimum przyrostu energii, w najprostszym przypadku względem poszukiwanych przyrostów ścinania. Wówczas wyznaczone niezerowe przyrosty ścinania określają zbiór systemów aktywnych w danej chwili deformacji, co skutecznie pokonuje trudności w doborze właściwych systemów. Do odnajdywania minimum przyrostu energii zastosowano metodę rozszerzonych mnożników Lagrange'a. Minimalizacja nie musi być zawsze wykonywana, bowiem gdy zbiór systemów jest już znany i na kroku deformacji nie ulega zmianie to w celu przyspieszenia obliczeń przyrosty ścinania są obliczane wprost z układu równań. Modelowanie procesów deformacji może się odbywać z kinematycznymi stopniami swobody, wówczas minimalizacja przyrostu energii jest wykonywana zarówno względem przyrostów ścinania jak i przyrostów składowych całkowitego

gradientu deformacji lub dodatkowych stopni swobody wprowadzonych do elementu reprezentatywnego. W przypadku, gdy odpowiedź materiału jest niejednoznaczna, algorytm wybiera to rozwiązanie, po którym można się spodziewać, że posiada fizyczne uzasadnienie wynikające z metody minimalizacji przyrostu energii. Zastosowanie tego algorytmu jest ograniczone przez wymóg symetrii nakładany na macierz interakcji systemów poślizgu plastycznego. Algorytm wykorzystuje niejawną schemat całkowania, więc został skonstruowany tak, że dla każdego kroku przy zadanym skończonym przyroście deformacji warunki plastyczności są spełniane na końcu kroku. Algorytm nie wykazuje numerycznych oscylacji rozwiązania nawet dla stosunkowo dużych przyrostów deformacji. W modelowaniu dużych deformacji ważną kwestią staje się prawidłowe obliczanie obrotów sieci kryształu, które nie mogą zostać pominięte. Obroty i rozciągnięcia sieci są wyznaczone wprost ze sprężystej części gradientu deformacji z wykorzystaniem funkcji eksponencjalnej argumentu macierzowego przybliżonej rozwinięciem w szereg potęgowy.

Algorytm obliczeniowy przetestowano na szeregu przykładach numerycznych symulacji, zarówno małych odkształceń jak i dużych deformacji kryształów i polikryształów miedzi oraz aluminium. Porównano m.in. wyniki uzyskane przy zastosowaniu trzech niezależnie zbudowanych algorytmów omówionych w punktach (5.3.1), (5.3.2) i (5.3.3), uzyskując potwierdzenie numerycznej poprawności ich działania. Wyniki dotyczą kryształów o sieci regularnie ściennie centrowanej, gdzie występuje dwanaście (dodatnich) systemów poślizgu. W modelowaniu zakładane są wartości modułów sprężystości sieci, granicy plastyczności oraz macierzy modułów wzmocnienia proporcjonalnych do wartości skalarnej funkcji umocnienia. Jedyny „niefizyczny” parametr r jest potrzeby do ustalania metody selektywnej symetryzacji, należy ustalić jego wartość z zakresu $0 \leq r \leq 1$. Proponowane podejście umożliwia śledzenie zmian w zbiorze systemów aktywnych, wartości ścięć na aktywowanych systemach, wartości naprężeń ścinających wszystkich systemów oraz ich wartości krytycznych, a tym samym wartości funkcji plastyczności. Obliczane wielkości umożliwiają wgląd w proces deformacji i ułatwiają analizę otrzymywanych rezultatów. W celu zilustrowania możliwości proponowanego algorytmu zamieszczono wyniki numerycznych symulacji wybranych procesów, takich jak jednoosiowe rozciąganie, proste ścinanie, próba kanalikowa oraz ściskanie w płaskim stanie odkształcenia. Zamieszczone porównania wyników numerycznych i obserwacji eksperymentalnych zaczerpniętych z literatury potwierdzają poprawność zastosowanych metod obliczeniowych. Na wynikach symulacji numerycznych jednoosiowego rozciągania widoczne jest, że poprawnie są wyznaczone aktywne systemy poślizgu i obrót sieci kryształu. To z kolei przekłada się na zadowalającą zgodność obliczonych i eksperymentalnych wartości naprężeń na kierunku rozciągania kryształu. Interesujących wyników dostarczyły numeryczne symulacje jednoosiowego rozciągania w orientacjach o wysokiej symetrii odniesione do obserwacji z wyraźnie widocznym obrotem osi rozciągania. Okazało się, że przy zastosowaniu prawa wzmocnienia, które uwzględnia zróżnicowany wpływ interakcji systemów na utajone wzmocnienie, minimalny przyrost energii implikuje rozwiązanie, które zgadza się z obserwacjami eksperymentalnymi.

Zamieszczone wyniki wybranych testów potwierdzają, że energetycznie preferowany typ deformacji w kryształach może stać się nierównomierny, prowadzić do tworzenia pasm deformacji i w efekcie do powstawania mikrostruktury (podstruktury). Na przykładzie modelowania ściskania w płaskim stanie odkształcenia wykazano, że minimalizacja energii przyrostowej powoduje powstawanie mikrostruktur poprzez podział kryształu na

warstwy, w których aktywna jest mniejsza liczba systemów poślizgu niż w kryształach bez podziału.

Algorytm metody minimalizacji przyrostu energii działa na tyle efektywnie, że daje możliwość modelowania procesów deformacji polikryształów złożonych z dużej liczby ziaren. W rozprawie zamieszczono przykładowe wyniki modelowania właściwości efektywnych polikryształów przy zastosowaniu schematu uśredniania Taylora. Zmieniające się tekstury polikryształu powstały na skutek obrotów sieci każdego ziarna z osobna.

Bibliografia

- L. Anand, M. Kothari: A computational procedure for rate-independent crystal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* **44** (4), 525–558, (1996).
- R.J. Asaro: Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals. *Acta Metall.* **27**, 445–453, (1979).
- R.J. Asaro: Crystal plasticity. *J. Appl. Mech. Trans ASME* **50**, 921–934, (1983).
- R.J. Asaro: Micromechanics of crystals and polycrystals. *Adv. Appl. Mech.* **23**, 1–115, (1983).
- R.J. Asaro, A. Needleman: Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall.* **33** (6), 923–953, (1985).
- R.J. Asaro, J.R. Rice: Strain localization in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids* **25** (5), 309–338, (1977).
- S. Aubry, M. Fago, M. Ortiz: A constrained sequential-lamination algorithm for the simulation of sub-grid microstructure in martensitic materials. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **192**, 2823–2843, (2003).
- S. Aubry, M. Ortiz: The mechanics of deformation-induced subgrain-dislocation structures in metallic crystals at large strains. *Proc. R. Soc. Lond. A* **459**, 3131–3158, (2003).
- D.M. Barnett: Elastic anisotropy. *Mechanics and materials: fundamentals and linkages*, M.A. Meyers, R.W. Armstrong, H.O. Kirchner (red.), Wiley, New York, 71–98, (1999).
- S.J. Basiński, Z.S. Basiński: Plastic deformation and work hardening. *Dislocations in Solids* **4**, 261–362, (1979).
- Z.S. Basiński, M.S. Szczerba, J.D. Embury: Tensile instability in face-centered cubic materials. *Phil. Mag., A* **76** (4), 743–752, (1997).
- J.L. Bassani: Single crystal hardening. *Appl. Mech. Rev.* **43**, S320–S327, (1990).
- J.L. Bassani: Plastic flow of crystals. *Adv. Appl. Mech.* **30**, 191–258, (1994).
- J.L. Bassani, T.-Y. Wu: Latent hardening in single crystals II. Analytical characterization and predictions. *Proc. Roy. Soc. Lond. A* **435**, 21–41, (1991).

- F. Basson, J.H. Driver: Deformation banding mechanisms during plane strain compression of cube-oriented f.c.c. crystals. *Acta Mater.* **48**, 2101–2115, (2000).
- D.P. Bertsekas: Nonlinear programming. Wyd. 2. Athena Scientific, Belmont, Massachusetts, (2003).
- R.I. Borja, J.R. Wren: Discrete micromechanics of elastoplastic crystals. *Int. J. Numer. Meth. Engng* **36**, 3815–3840, (1993).
- S.B. Brown, K.H. Kim, L. Anand: An internal variable constitutive model for hot working metals. *Int. J. Plasticity* **5**, 95–130, (1989).
- B. Budiansky, T.T. Wu: Theoretical prediction of plastic strains of polycrystals. Proc. 4th U. S. Nat. Congr. Appl. Mech., p. 1175, (1962).
- H.J. Bunge: Texture analysis in materials science. Mathematical Methods, Butterworths, London, (1982).
- A. Clement: Prediction of deformation texture using a physical principle of conservation. *Mater. Sci. Eng.* **55**, 203–201, (1982).
- A.H. Cottrell: Dislocations and plastic flow in crystals. Clarendon Press, Oxford, (1953).
- S.C. Cowin, M.M. Mehrabadi: Anisotropic symmetries of linear elasticity. *Applied Mechanics Reviews* **48** (5), 247–285, (1995).
- A.M. Cuitiño, M. Ortiz: Computational modelling of single crystals. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **1**, 225–263, (1992).
- M. Darrieulat, J.-Y. Poussardin, R.-Y. Fillit, Ch. Desrayaud: Homogeneity and heterogeneity in channel-die compressed Al-1%Mn single crystals: considerations on the activity of the slip systems. *Mater. Sci. Eng. A* **445–446**, 641–651, (2007).
- P.H. Dłużewski: Crystal orientation spaces and remarks on the modelling of polycrystal anisotropy. *J. Mech. Phys. Solids* **39** (5), 651–661, (1991).
- P.H. Dłużewski: Continuum theory of dislocations as a theory of constitutive modelling of finite elastic-plastic deformations. Rozprawa habilitacyjna, IPPT Reports 13/1996, (1996).
- M.K. Duszek-Perzyna, P. Perzyna: Adiabatic shear band localization in elastic-plastic single crystals. *Int. J. Solids Struct.* **30**, pp. 61–89 (1993).
- P. Franciosi: The concepts of latent hardening and strain hardening in metallic single crystals. *Acta Metall.* **33** (9), 1601–1612, (1985).
- R. Fortunier, J.H. Driver: A continuous constraints model for large strain grain deformations. *Acta Metall.* **35** (2), 509–517, (1987).
- P. Franciosi, M. Berveiller, A. Zaoui: Latent hardening in copper and aluminum single crystals. *Acta Metall.* **28** (3), 273–283, (1980).

-
- P. Franciosi, A. Zaoui: Multislip in f.c.c. crystals a theoretical approach compared with experimental data. *Acta Metall.* **30** (9), 1627–1637, (1982).
- P. Franciosi, A. Zaoui: Crystal hardening and the issue of uniqueness. *Int. J. Plasticity* **7**, 295–311, (1991).
- H.-H. Fu, D.J. Benson, M.A. Meyers: Computational description of nanocrystalline deformation based on crystal plasticity. *Acta Mater.* **52**, 4413–4425, (2004).
- A. Godfrey, D.J. Jensen, N. Hansen: Slip pattern, microstructure and local crystallography in an aluminum single crystal of brass orientation $\{110\}\langle 112\rangle$. *Acta Mater.* **46** (3), 823–833, (1998).
- K. Hackl, D.M. Kochmann: Relaxed potentials and evolution equations for inelastic microstructures. B.D. Reddy (red.), IUTAM Symposium on Theoretical, Modelling and Computational Aspects of Inelastic Media, Springer, 27–39, (2008).
- C.-S. Han, H. Gao, Y. Huang, W.D. Nix: Mechanism-based strain gradient crystal plasticity—I. Theory. *J. Mech. Phys. Solids* **53**, 1188–1203, (2005).
- K.S. Havner: Finite plastic deformation of crystalline solids. Cambridge University Press, Cambridge, (1992).
- K.S. Havner: Investigation of basic crystal hardening inequalities in a range of stable lattice orientations in (110) channel die compression. *Int. J. Plasticity* **24**, 74–88, (2008).
- K.S. Havner, A.H. Shalaby: A simple mathematical theory of finite distortional latent hardening in single crystals. *Proc. R. Soc. Lond. A* **358**, 47–70, (1977).
- K.S. Havner, A.H. Shalaby: Further investigation of a new hardening law in crystal plasticity. *Journal of Applied Mechanics. Transactions of the ASME* **45**, 500–506, (1978).
- K.S. Havner, P. Yu: Kinematic, stress, and hardening analysis in finite double slip. *Int. J. Plasticity* **21**, 83–99, (2005).
- R. Hill: Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals by multislip. *J. Mech. Phys. Solids* **14** (2), 95–102, (1966).
- R. Hill: On constitutive inequalities for simple materials. *J. Mech. Phys. Solids* **16** (4), 229–242, (1968).
- R. Hill: Aspects of invariance in solids mechanics. *Adv. Appl. Mech.* **18**. Academic Press, New York, 1–75, (1978).
- R. Hill, K.S. Havner: Perspectives in the mechanics of elastoplastic crystals. *J. Mech. Phys. Solids* **30** (1–2), 5–22, (1982).
- R. Hill, J.W. Hutchinson: Bifurcation phenomena in the plane tension test. *J. Mech. Phys. Solids* **23**, 239–264, (1975).

- R. Hill, J.R. Rice: Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain. *J. Mech. Phys. Solids* **20**, 401–413, (1972).
- W.F. Hosford Jr., R.L. Fleischer, W.A. Backofen: Tensile deformation of aluminum single crystals at low temperatures. *Acta Metall.* **8**, p. 187, (1960).
- T.J.R. Hughes, J. Winget: Finite rotation effects in numerical integration of rate constitutive equations arising in large-deformation analysis. *Int. J. Numer. Meths. Engng.* **15** (12), 1862–1867, (1980).
- D. Hull, D.J. Bacon: Introduction to dislocations. Wyd. 4, Butterworth-Heinemann, Oxford, (2001).
- J.W. Hutchinson: Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. *Proc. R. Soc. Lond. A* **319**, 247–272, (1970).
- P.J. Jackson, Z.S. Basiński: Latent hardening and the flow stress in copper single crystals. *Can. J. Phys.* **45**, str. 707, (1967).
- S.R. Kalidindi, C.A. Bronkhorst, L. Anand: Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of fcc metals. *Journal Mech. Phys. Solids* **40** (3), 537–569, (1992).
- S.R. Kalidindi, S.E. Schoenfeld: On the prediction of yield surfaces by the crystal plasticity models for fcc polycrystals. *Mater. Sci. Eng. A* **293**, 120–129, (2000).
- A.S. Khan, P. Cheng: An anisotropic elastic-plastic constitutive model for single and polycrystalline metals. I-theoretical developments. *Int. J. Plasticity* **12** (2), 147–162, (1996).
- K.H. Kim, Y.M. Koo: New interpretation about deviation of glide strains: in situ measurement by synchrotron radiation of lattice rotation in a copper single crystal. *Journal of Materials Science Letters* **20**, 625–627, (2001).
- R. Knockaert, Y. Chastel, E. Massoni: Rate-independent crystalline and polycrystalline plasticity, application to fcc materials. *Int. J. Plasticity* **16**, 179–198, (2000).
- U.F. Kocks: Polyslip in single crystals. *Acta Metall.* **8** (6), 345–352, (1960).
- U.F. Kocks: Latent hardening and secondary slip in aluminum and silver. *Transactions of The Metallurgical Society of AIME* **230**, 1160–1167, (1964).
- U.F. Kocks: The relation between polycrystal deformation and single-crystal deformation. *Metall. Trans* **1**, 1121–1142, (1970).
- U.F. Kocks, C.N. Tomé, H.-R. Wenk: Texture and anisotropy: preferred orientations in polycrystals and their effect on materials properties. Cambridge University Press, Cambridge (1998).
- W.T. Koiter: Stress-strain relations, uniqueness and variational theorems for elastic-plastic materials with a singular yield surface. *Q. Appl. Maths* **11**, 350–354, (1953).

-
- S. Kok, A.J. Beaudoin, D.A. Tortorelli: Numerical integration of lattice rotation in polycrystal plasticity. *Int. J. Numer. Meth. Engng* **52**, 1487–1500, (2001).
- K. Kowalczyk: Evolution of plastic anisotropy for the polycrystalline materials in large deformation processes. *Engineering Transactions* **49** (4), 537–571, (2001).
- D. Kuhlmann-Wilsdorf: “Regular” deformation bands (DBs) and the leds hypothesis. *Acta Mater.* **47** (6), 1697–1712, (1999).
- M. Kuroda, V. Tvergaard: Use of abrupt strain path change for determining subsequent yield surface: illustrations of basic idea. *Acta Mater.* **47**, 3879–3890, (1999).
- E.H. Lee: Elastic-plastic deformation at finite strains. *J. Appl. Mech. Trans ASME* **36**, 1–6, (1969).
- S. Mahesh, C.N Tomé: Deformation banding under arbitrary monotonic loading in cubic metals. *Phil. Mag.* **84** (33), 3517–3546, (2004).
- J. Mandel: Une généralisation de la theorie de koiter. *Int. J. Solids Struct.* **1**, 273–295, (1965).
- A.M. Maniatty, P.R. Dawson, Y.-S. Lee: A time integration algorithm for elastoviscoplastic cubic crystals applied to modelling polycrystalline deformation. *Int. J. Numer. Meth. Engng* **35**, 1565–1588, (1992).
- M.M. Mehrabadi, S.C. Cowin: Eigentensors of linear anisotropic elastic materials. *Quart. J. Mech. Appl. Math.* **43** (1), 15–41, (1990).
- C. Miehe: Exponential map algorithm for stress updates in anisotropic multiplicative elastoplasticity for single crystals. *Int. J. Numer. Meth. Engng* **39**, 3367–3390, (1996).
- C. Miehe: Multisurface thermoplasticity for single crystals at large strain in terms of eulerian vector updates. *Int. J. Solids Struct.* **33**, 20–22, (1996).
- C. Miehe, J. Schröder: A Comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity. *Int. J. Numer. Meth. Engng* **50**, 273–298, (2001).
- S. Miura, Y. Kuriyama, Y. Saeki,: Deformation behavior of $\langle 100 \rangle$ oriented copper single crystals. *Trans. Jap. Inst. Metals* **18**, 852–858, (1977).
- A. Morawiec: Orientations and rotations, computations in crystallographic textures. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, (2004).
- Z. Mróz: Non-associated flows in plasticity. *Journal de Mécanique* **2**, 21–22, (1963).
- E.A. de Souza Neto, D. Perić, D.R.J. Owen: Computational methods for plasticity: theory and applications. Wiley, United Kingdom, (2008).
- J. Nocedal, S.J. Wright: Numerical optimization. Springer, New York, (1999).

- J.F. Nye: Physical properties of crystal: their representation by tensors and matrices. Springer, Oxford, (1957).
- M. Ortiz, E.A. Repetto: Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids* **47**, 286–351, (1999).
- M. Ortiz, E.A. Repetto, L. Stainier: A theory of subgrain dislocation structures. *J. Mech. Phys. Solids* **48**, 2077–2114, (2000).
- I.A. Öding: Teoria dyslokacji w metalach i jej zastosowanie. PWN, Warszawa, (1961).
- D. Peirce, R.J. Asaro, A. Needleman: An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta Metall.* **30**, 1087–1119, (1982).
- D. Peirce, R.J. Asaro, A. Needleman: Material rate dependent and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metall.* **31** (12), 1951–1976, (1983).
- H. Petryk: A consistent energy approach to defining stability of plastic deformation processes. Stability in the mechanics of continua, F.H. Schroeder (red.), Proc. IUTAM Symp. Nümbrecht 1981, 262–272, Springer, Berlin (1982).
- H. Petryk: On energy criteria of plastic instability. In: Plastic Instability, Proc. Considère Memorial, Ecole Nat. Ponts Chauss., Paris, 215–226, (1985).
- H. Petryk: On stability and symmetry conditions in time-independent plasticity. *Arch. Mech.* **37** (4–5), 503–520, (1985).
- H. Petryk: On the second-order work in plasticity. *Arch. Mech.* **43** (2–3), 377–397, (1991).
- H. Petryk: The energy criteria of instability in time-independent inelastic solids. *Arch. Mech.* **43** (4), 519–545, (1991).
- H. Petryk: Material instability and strain-rate discontinuities in incrementally nonlinear continua. *J. Mech. Phys. Solids* **40** (6), 1227–1250, (1992).
- H. Petryk: Stability and constitutive inequalities in plasticity. Non-equilibrium thermodynamics with application to solids, W. Muschik (red.), CISM Courses and Lectures 336, Springer, Wien–New York, 259–329, (1993).
- H. Petryk: Thermodynamic stability of equilibrium in plasticity. *J. Non-Equil. Thermodyn.* **20**, 132–149, (1995).
- H. Petryk: Instability of plastic deformation processes. Theoretical and Applied Mechanics 1996, T. Tatsumi et al. (red.), Proceedings of the XIXth IUTAM Congress, Kyoto. Elsevier, Amsterdam, 497–516, (1997).
- H. Petryk: On the micro-macro transition and hardening moduli in plasticity. Proceedings of the IUTAM Symposium: Micro- and Macrostructural Aspects of Thermo-plasticity, Bochum 1997, Germany, O.T. Bruhns, E. Stein (red.), Dordrecht, Kluwer, 219–230, (1999).

-
- H. Petryk: General conditions for uniqueness in materials with multiple mechanisms of inelastic deformation. *J. Mech. Phys. Solids* **48**, 367–396, (2000).
- H. Petryk: Theory of material instability in incrementally nonlinear plasticity. Material instabilities in elastic and plastic solids, H. Petryk (red.), CISM courses and lectures, Springer, Wien, New York, Vol. **414**, 261–331, (2000).
- H. Petryk: Incremental energy minimization in dissipative solids. *C. R. Mecanique* **331**, 469–474, (2003).
- H. Petryk: Thermodynamic conditions for stability in materials with rate-independent dissipation. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **363**, 2479–2515, (2005).
- H. Petryk, K. Thermann: Post-critical plastic deformation in incrementally nonlinear materials. *J. Mech. Phys. Solids* **50**, 925–954, (2002).
- G.R. Piercy, R.W. Cahn, A.H. Cottrell: A study of primary and conjugate slip in crystals of alpha-brass. *Acta Metall.* **3**, 331–338, (1955).
- K. Przybyłowicz: Podstawy teoretyczne metaloznawstwa. WNT, Warszawa, (1999).
- M.M. Rashid, S. Nemat-Nasser: A constitutive algorithm for rate-dependent crystal plasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **94**, 201–228, (1992).
- W.T. Read Jr.: Dislocations in crystals. McGraw-Hill, New York, (1953).
- J.R. Rice: Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity. *J. Mech. Phys. Solids* **19**, 433–455, (1971).
- J.R. Rice: The localization of plastic deformation. *Theoretical and Applied Mechanics*, W.T. Koiter (red.), North-Holland, Amsterdam, 207–220, (1977).
- J. Rychlewski: On hooke's law. *Prikladnaja Matematika i Mekhanika* **48**(3), 420–435, Przetłumaczone w: *Journal of Applied Mathematics and Mechanics* **48**(3), 303–314, (1984).
- Y. Saeki, S. Miura: Plastic deformation and prominent cross slip of $\langle 100 \rangle$ oriented aluminum single crystals. *Trans. Jap. Inst. Metals* **18**, 843–851, (1977).
- E. Schmid, W. Boas: Plasticity of crystals. Chapman & Hall, London, (1950).
- M. Schmidt-Baldassari: Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **192**, 1261–1280, (2003).
- J. Schröder, C. Miehe: Aspects of computational rate-independent crystal plasticity. *Comput. Mater. Sci.* **9**, 168–176, (1997).
- J.C. Simo, T.J.R. Hughes: Computational inelasticity. Springer-Verlag, New York, (1998).
- S.M. Sivakumar, M. Ortiz: Microstructure evolution in the equal channel angular extrusion process. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **193**, 5177–5194, (2004).

- M.S. Szczerba: Transformations of dominant deformation systems in copper single crystals. *Archives of Metallurgy* **46** (1), 53–64, (2001).
- G.I. Taylor: Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals* **62**, 307–324 (1938).
- G.I. Taylor: Analysis of plastic strain in a cubic crystal. *Stephen Timoshenko 60th Anniversary Volume*, J.M. Lessels (red.), 218–224, New York: Macmillan, (1938).
- G.I. Taylor, C.F. Elam: The distortion of an aluminum crystal during a tensile test. *Proc. R. Soc. Lond. A* **102**, 643–667, (1923).
- G.I. Taylor, C.F. Elam: The plastic extension and fracture of aluminum crystals. *Proc. R. Soc. Lond. A* **108**, 28–51, (1925).
- C. Truesdell, W. Noll: The non-linear field theories of mechanics. S. Flügge (red.), *Handbuch der Physik*, Band III/3, Springer, Berlin, (1965).
- G.J. Weng: Kinematic hardening rule in single crystals. *Int. J. Solids Struct.* **15**, 861–890, (1979).
- G.J. Weng: Anisotropic hardening in single crystals and the plasticity of polycrystals. *Int. J. Plast.* **3**, 315–339, (1987).
- J.A. Wert, K. Kashiwara, T. Okada, X. Huang, F. Inoko: Deformation band evolution in [110] Al single crystals strained in tension. *Phil. Mag.* **85** (18), 1989–2006, (2005).
- J.A. Wert, C.T. Thorning: Grain subdivision in polycrystalline copper subject to tensile deformation. *Mater. Sci. Technol.* **21** (12), 1401–1406, (2005).
- T.-Y. Wu, J.L. Bassani, C. Laird: Latent hardening in single crystals I. Theory and explanations. *Proc. R. Soc. Lond. A* **435**, 1–19, (1991).
- P.D. Wu, K.W. Neale, E. Van der Giessen: Simulation of the behaviour of fcc polycrystals during reversed torsion. *Int. J. Plasticity* **12** (9), 1199–1219, (1996).