

Гладких, П. А. Влияние выбора активных систем скольжения в двухуровневых упругопластических моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла на отклик поликристаллических материалов / П. А. Гладких, П. В. Трусов // Прикладная математика и вопросы управления. – 2023. – № 3. – С. 22–38. DOI 10.15593/2499-9873/2023.3.02

Библиографическое описание согласно ГОСТ Р 7.0.100–2018

Гладких, П. А. Влияние выбора активных систем скольжения в двухуровневых упругопластических моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла на отклик поликристаллических материалов / П. А. Гладких, П. В. Трусов. – Текст : непосредственный. – DOI 10.15593/2499-9873/2023.3.02 // Прикладная математика и вопросы управления / Applied Mathematics and Control Sciences. – 2023. – № 3. – С. 22–38.



ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА
И ВОПРОСЫ УПРАВЛЕНИЯ

№ 3, 2023

<https://ered.pstu.ru/index.php/amcs>



Научная статья

DOI: 10.15593/2499-9873/2023.3.02

УДК 539.214



Влияние выбора активных систем скольжения в двухуровневых упругопластических моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла на отклик поликристаллических материалов

П.А. Гладких, П.В. Трусов

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 14 августа 2023
Одобрена: 06 сентября 2023
Принята к публикации:
11 сентября 2023

Финансирование

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобр России в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2021-0012.

Конфликт интересов

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Вклад авторов

Равноценен

Ключевые слова:

физически-ориентированные модели типа Тейлора – Бишопа – Хилла, упругопластическая модель Линя, влияние неопределенности выбора активных систем скольжения, сложное нагружение, физические теории пластичности, конститутивные модели, определяющие соотношения.

АННОТАЦИЯ

В процессах обработки металлов и сплавов для получения готовых изделий существенно меняется внутренняя структура и зависящие от нее свойства различных масштабных уровней материала, прогнозирование которых с применением эмпирических методов чрезвычайно затратно. По этой причине разработка технологий обработки немыслима без математических моделей, центральным элементом которых является определяющие соотношения.

Перспективным для построения последних является физический подход, позволяющий описывать эволюцию внутренней структуры на различных масштабных уровнях. Как правило, такие модели материалов являются многоуровневыми и представляют целый класс конститутивных моделей.

Отдельным интерес представляют упругопластические модели, так как позволяют проводить расчеты с достаточно большими шагами по времени. Большинство моделей этого типа основаны на модели Тейлора – Бишопа – Хилла, но они имеют недостаток: неопределенность в выборе набора активных систем скольжения.

В данной работе исследуется влияние случайного выбора наборов активных систем скольжения в упругопластических моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла на результаты моделирования деформирования поликристаллов. Показано, что с ростом деформаций случайный выбор наборов активных систем скольжения приводит к практически монотонному увеличению различий при расчете тензора напряжений макроуровня и углов разориентации между зернами. Данный факт означает, что присущая указанным моделям проблема неопределенности оказывает влияние на результаты моделирования. Это свидетельствует о необходимости разработки алгоритма, позволяющего устранить отмеченную неопределенность, что составляет предмет готовящейся публикации авторов.

© ПНИПУ

© **Гладких Павел Андреевич** – лаборант-исследователь, лаборатория многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, e-mail: gladkikh.p@yandex.ru, ORCID: 0000-0002-8196-6661.

Трусов Петр Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Математическое моделирование систем и процессов», e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru, ORCID: 0000-0001-8997-5493.



Эта статья доступна в соответствии с условиями лицензии Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

Perm Polytech Style: Gladkikh P.A., Trusov P.V. Effect of the choice of active slip systems in two-level Taylor – Bishop – Hill type elastic-plastic models on the response of polycrystalline materials. *Applied Mathematics and Control Sciences*. 2023, no. 3, pp. 22–38. DOI: 10.15593/2499-9873/2023.3.02

MDPI and ACS Style: Gladkikh, P.A.; Trusov, P.V. Effect of the choice of active slip systems in two-level Taylor – Bishop – Hill type elastic-plastic models on the response of polycrystalline materials. *Appl. Math. Control Sci.* 2023, 3, 22–38. <https://doi.org/10.15593/2499-9873/2023.3.02>

Chicago/Turabian Style: Gladkikh, Pavel A., and Peter V. Trusov. 2023. “Effect of the choice of active slip systems in two-level Taylor – Bishop – Hill type elastic-plastic models on the response of polycrystalline materials”. *Appl. Math. Control Sci.* no. 3: 22–38. <https://doi.org/10.15593/2499-9873/2023.3.02>



APPLIED MATHEMATICS
AND CONTROL SCIENCES
№ 3, 2023
<https://ered.pstu.ru/index.php/amcs>



Article

DOI: 10.15593/2499-9873/2023.3.02

UDC 539.214



Effect of the choice of active slip systems in two-level Taylor – Bishop – Hill type elastic-plastic models on the response of polycrystalline materials

P.A. Gladkikh, P.V. Trusov

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 14 August 2023
Approved: 06 September 2023
Accepted for publication:
11 September 2023

Funding

The work was financially supported by the Ministry of Education and Science of Russia within the framework of the state task in the laboratory of multilevel modeling of structural and functional materials, project No. FSNM-2021-0012.

Conflicts of Interest

The authors declare no conflict of interest.

Author Contributions

Equivalent

Keywords:

physically oriented models of the Taylor – Bishop – Hill type, elastoplastic Lin model, influence of uncertainty in the choice of active slip systems, complex loading, crystal plasticity, constitutive models defining relations.

ABSTRACT

In the processes of their processing to obtain finished products, the internal structure and the properties of various scale levels of the material that depend on it change significantly, the prediction of which using empirical methods is extremely costly. For this reason, the development of processing technologies is unthinkable without mathematical models, the central element of which is constitutive relations.

A promising approach for constructing the latter is the physical approach, which makes it possible to describe the evolution of the internal structure at various scale levels. As a rule, such models of materials are multilevel and represent a whole class of constitutive models.

Of particular interest are elastoplastic models, since they allow calculations with sufficiently large time steps. Most models of this type are based on the Taylor – Bishop – Hill model. Models of this type have a drawback: uncertainty in the choice of a set of active slip systems. This uncertainty is due to the fact that the dislocation shear rates along slip systems are determined from a system of equations, the dimension of which may exceed the dimension of the space of independent variables being sought.

In this paper, we study the influence of a random choice of sets of active slip systems in elastoplastic models of the Taylor – Bishop – Hill type on the results of modeling the elastoplastic deformation of polycrystals with a face-centered cubic lattice. The deviation in the simulation results was considered for a random choice of sets of active slip systems. For this purpose, special metrics were introduced to show the effect of uncertainty on the macrolevel stress tensor and misorientation angles between crystallites. It is shown that with increasing strains, a random choice of sets of active slip systems leads to an almost monotonous increase in differences in the calculation of the macrolevel stress tensor and misorientation angles between grains. This fact means that the problem of uncertainty in the choice of active slip systems inherent in these models affects the simulation results. The indicated discrepancy between the simulation results evidences the need to develop an algorithm to eliminate the noted uncertainty, which is the subject of the forthcoming publication of the authors.

© PNRPU

© Pavel A. Gladkikh – Research Laboratory Technician, Laboratory of Multilevel Modeling of Structural and Functional Materials, e-mail: gladkikh.p@yandex.ru, ORCID: 0009-0004-9635-0191.

Peter V. Trusov – Doctor of Sciences in Physics and Mathematics, Professor, Head of Department, Department of Mathematical Modeling of Systems and Processes, e-mail: tpv@matmod.pstu.ac.ru, ORCID: 0000-0001-8997-5493.



This work is licensed under a Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (CC BY-NC 4.0)

Введение

Несмотря на расширяющееся применение полимерных и композиционных изделий, металлы и сплавы продолжают оставаться основными конструкционными материалами. Большая часть деталей из сплавов изготавливается методами термомеханической обработки. В зависимости от способа получения и обработки сплавов существенно меняется их внутренняя структура на различных масштабных уровнях, что приводит к изменению физико-механических свойств материалов и эксплуатационных характеристик изделий из них. Разработка технологий обработки в настоящее время немыслима без применения математического моделирования. Центральным элементом математических моделей при этом являются конститутивные модели (КМ) (или определяющие соотношения (ОС)) [1–2]. Можно выделить четыре основных подхода к построению КМ: макрофеноменологический, структурно-механический, термодинамический, физический.

Наиболее перспективным, по мнению авторов, является физический подход, в котором в явной форме описываются физические механизмы необратимых изменений эволюционирующей структуры различных уровней и их носители. Следует отметить, что данные КМ оперируют физическими законами, справедливыми для целых классов материалов, что делает их существенно более универсальными в сравнении с моделями, создаваемыми в рамках других подходов. Среди моделей, сформулированных в рамках физического подхода, наиболее распространенными являются физические теории пластичности (ФТП), подразделяемые на жесткопластические, упругопластические, вязкоупругие, вязкопластические, упруговязкопластические КМ [3–6].

Модели данного класса обычно являются многоуровневыми, классифицируются по способу организации связей элементов соседних уровней на статистические, самосогласованные и прямые [7–14]. Самосогласованные и прямые модели требуют весьма значительных вычислительных ресурсов, в связи с чем наиболее распространенными в настоящее время являются статистические модели. С вычислительной точки зрения наибольшую эффективность демонстрируют упругопластические модели, позволяющие производить расчеты с относительно большими шагами по времени по сравнению с упруговязкопластическими моделями [15]. Большинство моделей данного типа восходят к модели Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ). В них, в свою очередь, существует труднопреодолимая сложность: проблема неопределенности выбора наборов активных систем скольжения (СС) в металлах и сплавах. Указанная неопределенность связана с тем, что число линейно независимых разрешающих уравнений в упругопластических моделях не может превышать пяти. В соответствии с законом Шмида активные СС определяются как системы, в которых касательные напряжения достигают критических значений. Иначе говоря, для этого изображающая точка в пространстве напряжений (ИТН) должна находиться на поверхности (на гранях, ребрах или в вершинах) многогранника текучести. С другой стороны, для реализации произвольной пластической (изохорической) деформации необходима активация не менее пяти систем скольжения. Поверхность (многогранник) текучести для известных кристаллов имеет, как правило, вершины порядка выше 5-го (например, начальный многогранник текучести для ГЦК-кристаллов имеет вершины 6-го и 8-го порядков). Нахождение в такой вершине ИТН соответствует активации более чем пяти СС, при этом все эти системы равноправны с точки зрения выполнения критерия Шмида.

Данную проблему чаще всего решают при помощи предложенного Тейлором эвристического принципа минимума суммы приращений сдвигов по всем активным СС на шаге [16]. Позднее данное утверждение получило строгое доказательство в работах Бишопа и Хилла

[17; 18] и сформулировано как принцип минимальной мощности; при этом в указанном принципе отсутствует ограничение на количество активных систем. Функционал и ограничения в данном принципе являются линейными функциями, в силу чего поиск активных СС, доставляющих экстремум целевой функции, сводится к задаче линейного программирования, для которой отсутствует математически строгое доказательство единственности, что отмечалось в многочисленных работах [2; 6; 19; 20].

Ранее исследователями предлагались различные способы решения данной проблемы для частных случаев [21–26]. Например, в работе [26] предлагается в случае попадания ИТН в вершину порядка выше пятого использовать процедуру случайного возмущения критических напряжений, что обосновывалось наличием в реальных кристаллитах недетерминированных различий в критических напряжениях. В [23] представлены условия корректности модели пластичности, не зависящей от скорости. Условие единственности определения набора активных СС в монокристалле для произвольного НДС с нелинейным упрочнением получено с использованием теоремы о неявной функции. В работе [24] рассматривается использование модели Линя для описания упругопластического деформирования монокристаллов. Рассмотрен частный случай ориентировки кристаллита по отношению к направлению одноосного нагружения (растяжения – сжатия). В рассматриваемом случае совпадения направления $[0\ 0\ 1]$ ГЦК кристалла с осью нагружения по всем одновременно активизируемым кристаллографическим плоскостям $\{1\ 1\ 1\}$ должны реализовываться одинаковые сдвиги (до выхода той или иной СС из числа активных). Результаты показали хорошее соответствие с опытными данными. В работе [25] вероятность активации СС определяется уровнем запасенной на ней энергии, а непосредственно выбор активной системы осуществляется с использованием метода Монте-Карло. Отметим, что все отмеченные гипотезы не имеют убедительного физического обоснования, поскольку при достижении касательным напряжением критического значения все СС, на которых выполняется критерий Шмида, с точки зрения теории дислокаций являются активными.

Отметим, что авторам не известны работы, в которых бы проверялось влияние неопределенности на результаты моделирования. В то же время можно предположить, что неопределенность не оказывает значимого влияния на результаты моделирования. В случае, если такое предположение окажется справедливым, проблема неопределенности теряет значимость.

Цель исследования – проверка значимости влияния неопределенности выбора наборов активных СС в кристаллитах на результаты моделирования упругопластического деформирования поликристаллических образцов. В случае, если этим влиянием нельзя пренебречь, – предложить физически обоснованный метод решения данной проблемы.

Математическая формулировка модели Линя

В данной работе двухуровневая (макро- и мезоуровни) упругопластическая модель Линя принимается в качестве базовой. Элементами макро- и мезоуровня являются соответственно представительный макрообъем поликристалла и кристаллит (зерно, субзерно). Для связи подмоделей мезо- и макроуровней применяется обобщенная гипотеза Фойгта, операции осреднения тензоров напряжений, упругопластических свойств, спина, пластической части тензора деформации скорости; родственные характеристики разных уровней будут обозначаться одинаковыми буквами (макроуровня – прописными, мезоуровня – строчными).

Система уравнений, служащая для описания поведения материала представительного объема макроуровня, имеет следующий вид:

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\Sigma}^r = \boldsymbol{\Pi} : \mathbf{D}^e = \boldsymbol{\Pi} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p), \\ \boldsymbol{\Sigma}^r = \dot{\boldsymbol{\Sigma}} - \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Sigma} + \boldsymbol{\Sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}, \\ \mathbf{L} = (\hat{\nabla} \mathbf{V})^T = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1}, \\ \mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^p, \\ \mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T), \\ \boldsymbol{\Sigma} = \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \\ \boldsymbol{\Pi} = \langle \mathbf{n} \rangle, \\ \boldsymbol{\Omega} = \langle \boldsymbol{\omega} \rangle, \\ \mathbf{D}^p = \langle \mathbf{d}^p \rangle, \end{array} \right. \quad (1)$$

где $\boldsymbol{\Sigma}$ – тензор напряжений макроуровня, r – обозначение коротационной производной, $(\dot{\cdot})$ – обозначение материальной производной по времени, $\boldsymbol{\Pi}$ – тензор упругих свойств макроуровня, \mathbf{D} , \mathbf{D}^e , \mathbf{D}^p – тензор деформации скорости макроуровня, его упругая и пластическая составляющие соответственно, \mathbf{F} – аффинор деформаций, \mathbf{L} – транспонированный градиент скорости перемещения макроуровня, $\boldsymbol{\Omega}$ – спин макроуровня, $\langle \cdot \rangle$ – обозначение операции осреднения по представительному объему макроуровня.

Система уравнений для описания поведения элементов мезоуровня имеет следующий вид (обозначение номеров кристаллитов опущены):

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\sigma}^r = \mathbf{n} : \mathbf{d}^e = \mathbf{n} : (\mathbf{d} - \mathbf{d}^p), \\ \boldsymbol{\sigma}^r = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \\ \mathbf{L} = \mathbf{l}, \\ \mathbf{d}^p = \sum_{k=1}^{2K} \mathbf{m}_{(S)}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \\ \mathbf{m}_{(S)}^{(i)} : \mathbf{n} : (\mathbf{d} - \sum_{k=1}^{2K} \mathbf{m}_{(S)}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}) = \dot{\tau}_c^{(i)}, i = \overline{1, 2K}, \\ \dot{\tau}_c^{(i)} = \sum_{k=1}^{2K} H^{ik} \dot{\gamma}^{(k)}, \\ \mathbf{w} = \frac{1}{2}((\hat{\nabla} \mathbf{v})^T - \hat{\nabla} \mathbf{v}) = \mathbf{w}^e + \mathbf{w}^p, \\ \mathbf{d} = \frac{1}{2}(\hat{\nabla} \mathbf{v} + (\hat{\nabla} \mathbf{v})^T) = \mathbf{d}^e + \mathbf{d}^p, \\ \boldsymbol{\omega} = \mathbf{w}^e = \mathbf{w} - \mathbf{w}^p = \mathbf{w} - \sum_{i=1}^{2K} \frac{1}{2} \dot{\gamma}^{(i)} (\mathbf{b}^i \mathbf{n}^i - \mathbf{n}^i \mathbf{b}^i), \\ \dot{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{o}^T = \boldsymbol{\omega}, \end{array} \right. \quad (2)$$

где $\dot{\gamma}^{(k)}$ – скорость сдвига по k -й системе скольжения, $\tau_c^{(k)}$, $\dot{\tau}_c^{(k)}$ – критическое напряжение на k -й системе скольжения и скорость его изменения, $\mathbf{m}^{(k)} = \mathbf{b}^{(k)} \mathbf{n}^{(k)}$ – ориентационный тен-

зор k -й системы скольжения, $\mathbf{m}_{(s)}^{(k)}$ – симметризованный ориентационный тензор k -й системы скольжения (СС), \mathbf{w} , \mathbf{w}^e , \mathbf{w}^p – тензор вихря мезоуровня, его упругая и пластическая составляющие соответственно, K – число СС (используется удвоенное число систем, так что в активных системах скорости сдвигов и касательные напряжения всегда положительны). Для разложения движения на квазитвердое и деформационное в каждом кристаллите вводится жесткая декартова подвижная система координат (ПСК), связанная с решеткой; при численной реализации алгоритма на мезоуровне компоненты тензоров напряжений определяются в ортонормированном базисе ПСК [6]. В качестве модели ротации принимается модель Тейлора, $\boldsymbol{\omega}$ – тензор спина ПСК. При задании начальных условий принимается гипотеза о естественной конфигурации.

В качестве закона упрочнения в рамках настоящей работы принимается квазилинейный анизотропный закон:

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{\tau}_c^{(i)} = \sum_{k=1}^{2K} H^{ik} \dot{\gamma}^{(k)}, \\ H^{ik} = q^{ik} h^{(k)}, \\ q^{ik} = \begin{cases} A, & i = k, \\ qA, & i \neq k, \end{cases} \\ h^{(k)} = h_0 \left| 1 - \frac{\tau_c^{(k)}}{\tau_s} \right|^\alpha, \end{array} \right. \quad (3)$$

где H^{ik} , q^{ik} , A , q , h_0 – параметры закона упрочнения, τ_s – напряжения насыщения (для ГЦК-решетки полагаются одинаковыми для всех СС).

Алгоритм реализации модели

Рассмотрим алгоритм расчета напряженно-деформированного состояния (НДС) и изменения параметров мезоструктуры (критических и касательных напряжений, скоростей и накопленных сдвигов по СС, ориентаций кристаллитов) представительного макрообъема (аналога макрообразца) при предписанном законе жесткого (кинематического) нагружения.

В силу существенной нелинейности системы уравнений модели весь интервал нагружения, от начала деформирования до достижения предписанной деформации, представляется совокупностью малых шагов по времени; на начальной стадии деформирования шаги нагружения определяются из условия активации только одной «новой» СС в каждом кристаллите. В начале работы алгоритма задаются начальные условия, объемы и ориентации, физико-механические характеристики кристаллитов, а также кинематические воздействия как непрерывная тензорзначная функция времени ($\hat{\mathbf{V}}\mathbf{V}(t)$).

В рамках данной работы принимается гипотеза о естественной начальной конфигурации, что соответствует следующим начальным условиям:

– начальным условиям макроуровня:

$$\boldsymbol{\Sigma} \Big|_{t=0} = 0; \quad (4)$$

– начальным условиям мезоуровня (для каждого кристаллита):

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\sigma}^{(i)} \Big|_{t=0} &= 0, \\
 \mathbf{o}^{(i)} \Big|_{t=0} &= \mathbf{o}_0^{(i)}, \\
 \tau_c^{(i,k)} \Big|_{t=0} &= \tau_{c0}, \quad i = \overline{1, N}, \quad k = \overline{1, K},
 \end{aligned} \tag{5}$$

где тензор начальной ориентации кристаллитов \mathbf{o}_0 определяется согласно закону случайного равномерного распределения, N, K – число кристаллитов в представительном макрообъеме и число СС в каждом кристаллите. Также принимается, что сдвиги по СС в каждом кристаллите равны нулю, а объемы зерен равны между собой.

Пусть на начало шага $t = t_i$ некоторого временного интервала $t \in [t_i, t_{i+1}]$ известны значения параметров отклика и всех внутренних переменных (равных значениям соответствующих параметров на конец предыдущего временного шага), используемых в постановке задачи. Необходимо определить значения переменных модели на конец временного шага $t = t_{i+1}$ (характеристики скоростей изменения величин на данном шаге определяются на момент $t = t_i$), для чего последовательно выполняются следующие шаги:

1. Вычисления на мезоуровне (в цикле по кристаллитам, индекс кристаллита опущен). Все вычисления на этом этапе производятся в терминах компонент тензоров в базисе ПСК, при этом материальные параметры полагаются «вмороженными» в ПСК. Определяются активные СС, предполагается, что активные на начало шага СС будут активны в течение всего шага.

1.1. Определение набора активных систем скольжения. В рамках данной работы перебирались все возможные комбинации активных систем скольжения из тех, которые активны на конец предыдущего шага и обеспечивали положительность скоростей сдвигов и выполнение критерия Шмида. Затем осуществлялся случайный выбор из найденных наборов по пяти СС. В случае активации новой системы скольжения на данном шаге происходит поиск подшага, на конец которого система активизируется, с использованием которого определяются величины на конец данного подшага.

1.2. Определение скоростей сдвигов по системам скольжения. Из системы (2), которая составляется только для набора, содержащего не более пяти СС, являющихся активными на данном шаге, с использованием заданного $\mathbf{I}(t_i)$ вычисляются скорости сдвигов $\dot{\gamma}^{(k)}(t_i), k = 1, \dots, 2K$. Зная скорости сдвигов, с использованием принятого закона упрочнения определяются скорости изменения критических напряжений СС $\dot{\tau}_c^{(k)}(t_i), k = 1, \dots, 2K$. После этого из соответствующих соотношений (2) вычисляются пластическая часть тензора деформации скорости $\mathbf{d}^p(t_i)$, спин ПСК $\boldsymbol{\omega}(t_i)$ и коротационная производная тензора напряжений $\boldsymbol{\sigma}^r(t_i)$. Используя значения $\boldsymbol{\sigma}^r(t_i), \boldsymbol{\omega}(t_i)$ и определенный на конец предыдущего шага (начало текущего) тензор $\boldsymbol{\sigma}(t_i)$, вычисляются компоненты тензора скорости изменения напряжений $\dot{\boldsymbol{\sigma}}(t_i)$. Стоит заметить, что коротационная производная тензора напряжений задает его изменение с позиции наблюдателя в ПСК, т.е. скорости изменения компонент тензоров в базисе ПСК определяют коротационную производную соответствующих тензоров. В силу этого при записи упругого закона в скоростной форме в терминах компонент тензоров в базисе ПСК можно вместо коротационной производной тензора напряжений использовать материальную производную его компонент в базисе ПСК, что позволяет определить эти компоненты на конец шага обычным интегрированием.

1.3. Интегрирование переменных. Для интегрирования соотношения $dy/dt = f(t, y)$ применяется прямая схема Эйлера:

$$y_{i+1}(t_{i+1}) = y_i(t_i) + \Delta t f(t_i, y_i),$$

где $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ – шаг по времени. С применением данной схемы определяются значения всех переменных на конец шага – сдвиги $\gamma^{(k)}(t_{i+1})$, критические напряжения $\tau_c^{(k)}(t_{i+1})$, а также компоненты тензора напряжений в ПСК (черта сверху означает, что компоненты тензоров заданы в ПСК):

$$\bar{\sigma}_{jk}(t_{i+1}) = \bar{\sigma}_{jk}(t_i) + \Delta t \bar{\sigma}_{jk}^r(t_i) = \bar{\sigma}_{jk}(t_i) + \Delta t \bar{\pi}_{jkqt} (\bar{d}_{tq}(t_i) - \bar{d}_{tq}^p(t_i)).$$

1.4. Изменение ориентаций кристаллитов. По тензору спина ω устанавливается вектор скорости поворота: $\dot{\phi} = 1/2(\epsilon : \omega)$, где ϵ – тензор Леви – Чивиты. После определения вектора скорости поворота последовательно вычисляются: мгновенная ось поворота $e(t_i) = \dot{\phi}(t_i) / |\dot{\phi}(t_i)|$, приращение угла поворота $\Delta\phi(t_i) = \Delta t |\dot{\phi}(t_i)|$, приращение тензора поворота за текущий шаг $\Delta o(t_i) = [1 - \cos(\Delta\phi(t_i))]e(t_i)e(t_i) + \cos(\Delta\phi(t_i))E + \sin(\Delta\phi(t_i))e(t_i) \times E$. Тензор ориентации ПСК на конец шага определяется как:

$$o(t_{i+1}) = \Delta o(t_i) \cdot o(t_i).$$

2. Вычисления на макроуровне. Поскольку алгебраические операции с тензорами осуществляются через их компоненты, участвующие тензоры должны быть приведены к единому базису. В связи с этим при применении процедуры осреднения тензоры определенные изначально в базисе ПСК переводятся в базис ЛСК с использованием тензора $o(t_{i+1})$.

Осреднением параметров мезоуровня определяются значения внутренних переменных макроуровня на конец текущего шага по времени: тензора спина Ω , пластической части тензора деформации скорости D^p , а также тензора напряжений Σ .

План численных экспериментов

Общий план численных экспериментов представлен в табл. 1. В столбцах указано, какие факторы будут учитываться (+) в эксперименте, а какие – нет (–) (в первом столбце показаны номера опытов). Во всех экспериментах моделирование производилось для представительного объема из 512 зерен с соответствующей скоростью деформаций 0.001 с^{-1} ; во всех случаях использован анизотропный закон упрочнения. В отчетной конфигурации распределение ориентаций зерен определяется равномерным законом, а объемы зерен принимаются одинаковыми.

Таблица 1

План численных экспериментов

№ п/п	Материал	Вид нагружения	Учет ротации зерен
1	Медь	Квазиодноосное растяжение	+
2	Медь	Квазиодноосное растяжение	–
3	Медь	Квазиодноосное сжатие	+
4	Медь	Простой сдвиг	+
5	Алюминий	Квазиодноосное растяжение	+
6	Медь	Сложное нагружение (простой сдвиг до 6 % сдвиговых деформаций + квазиодноосное растяжение до 50 % деформаций)	+
7	Медь	Сложное нагружение (прокатка до 25 % деформаций с последующим квазиодноосным растяжением до 50 %)	+

Параметры для закона упрочнения меди определены по экспериментальным данным, приведенным в [27]. Идентификация производилась по данным испытаний на простой сдвиг, а верификация – на растяжение и сжатие. В результате были получены следующие параметры закона упрочнения:

$$\begin{aligned}
 A &= 1, \\
 q &= 1,4, \\
 \tau_{c_0} &= 7 \text{ (МПа)}, \\
 \tau_s &= 148 \text{ (МПа)}, \\
 \alpha &= 2,5, \\
 h_0 &= 200 \text{ (МПа)}.
 \end{aligned}$$

Как можно видеть из рис. 1, 2, найденные параметры обеспечивают удовлетворительную точность моделирования в рассматриваемом диапазоне деформаций [0, 0,5].

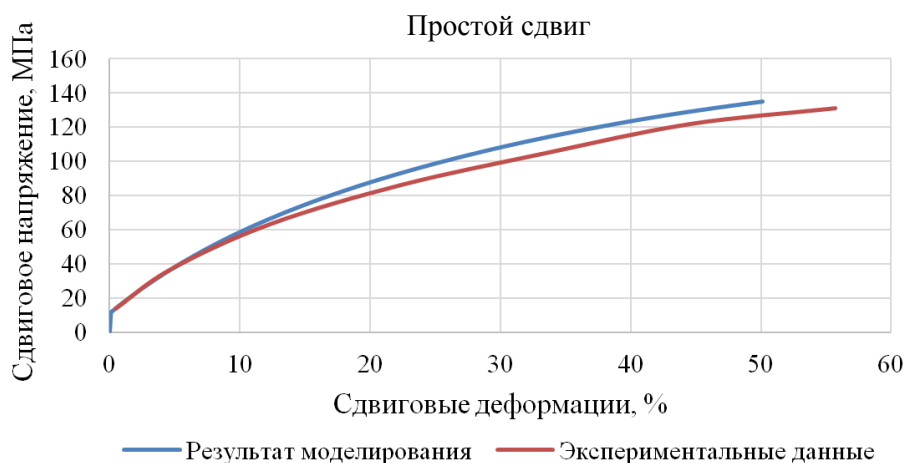


Рис. 1. Результаты идентификации параметров модели для медного образца

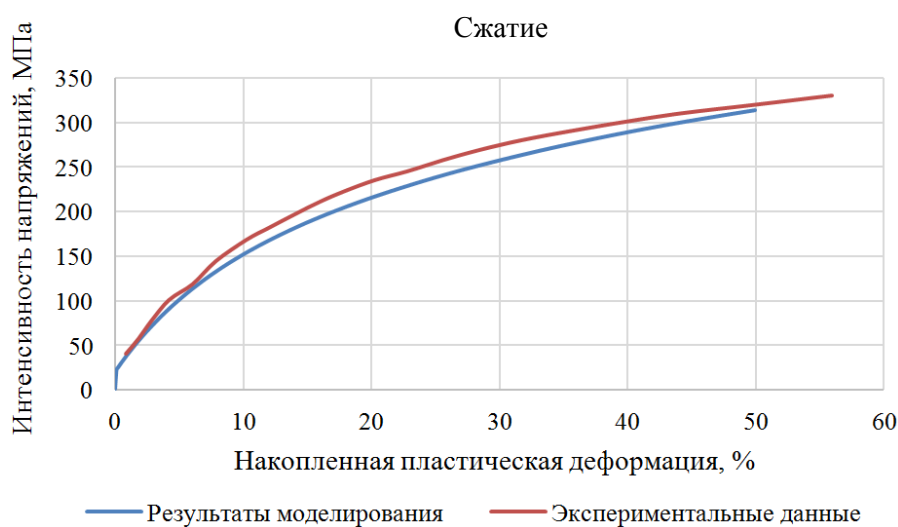


Рис. 2. Результаты верификация параметров модели для медного образца

Для алюминия параметры закона упрочнения определялись по экспериментальным данным, приведенным в [28]:

$$\begin{aligned}
 A &= 1, \\
 q &= 2, \\
 \tau_{c_0} &= 6 \text{ (МПа)}, \\
 \tau_s &= 34 \text{ (МПа)}, \\
 \alpha &= 2,25, \\
 h_0 &= 115 \text{ (МПа)}.
 \end{aligned}$$

Для проведения расчетов были использованы приведенные в литературе упругие константы: для меди – в [29], алюминия – в [30] (табл. 2).

Таблица 2

Упругие константы материалов

Параметр	Медь	Алюминий
Π_{1111} (ГПа)	168,4	107,3
Π_{1122} (ГПа)	121,4	60,08
Π_{1212} (ГПа)	75,4	28,3

Для реализации изложенных выше условий нагружения использован кинематический способ задания движения, определяемый следующими тензорами транспонированных градиентов скоростей перемещений \mathbf{L} :

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L}_{\text{сдвиг}} &= \dot{\epsilon} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2, \\
 \mathbf{L}_{\text{растяжение}} &= \dot{\epsilon} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 - \frac{\dot{\epsilon}}{2} \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3, \\
 \mathbf{L}_{\text{прокатка}} &= \dot{\epsilon} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 - \dot{\epsilon} \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2
 \end{aligned}$$

где $\dot{\epsilon}$ – задаваемая величина скорости деформации (в случае простого сдвига – сдвиговой деформации, в случае растяжения/сжатия – одноосной деформации). Использована декартова ортогональная условно неподвижная лабораторная система координат (ЛСК). Оси обработки совпадают с осями лабораторной системы координат. Нагружение реализовано в соответствии с транспонированными градиентами скорости, приведенными выше.

Анализ влияния неопределенности на тензор напряжений макроуровня

Для оценки того, насколько отличаются значения компонент тензора напряжений при разных выборах активных СС, вычислялось среднее по случайно выбранным наборам активных систем скольжения значение каждой компоненты тензора напряжений Коши для представительного макрообъема в базисе ЛСК, затем определялось максимальное отклонение компонент тензора от среднего между результатами с различными наборами активных СС. Для оценки вводилось четыре метрики: две – описывающие влияние на инварианты, и две – для определения различия нормальных и касательных напряжений:

$$F_1^v(s) = \frac{|\sigma_u^v - \bar{\sigma}_u(s)|}{\bar{\sigma}_u(s)}, \quad (6)$$

$$F_2^v(s) = \left| \sqrt[3]{I_3^v(\Sigma)} - \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \sqrt[3]{I_3^n(\Sigma)} \right| / \bar{\sigma}_u(s), \quad (7)$$

$$F_3^v(s) = \max \left| \Sigma_{ii}^{v, \text{лск}}(s) - \bar{\Sigma}_{ii}^{\text{лск}}(s) \right| / \bar{\sigma}_u(s), i = \{1, 2, 3\}, \sum_i, \quad (8)$$

$$F_4^v(s) = \max \left| \Sigma_{ij}^{v, \text{лск}}(s) - \bar{\Sigma}_{ij}^{\text{лск}}(s) \right| / \bar{\sigma}_u(s), i, j = \{1, 2, 3\}, i \neq j, \quad (9)$$

где i, j – индексы компонентов тензоров Коши в лабораторной системе координат, N – число наборов активных систем скольжения, v – номер варианта выбора активных СС, для которого определяется отклонение, s – величина накопленной деформации на момент определения оценки, чертой сверху обозначены средние по вариантам выбора различных наборов активных СС. Первые две метрики описывают, как сильно отклоняются инварианты относительно среднего между разными выборами активных СС. Остальные две метрики описывают влияние на диагональные и не диагональные компоненты тензора напряжений.

Для отображения и дальнейшего анализа вместо рассмотрения всего множества кривых для всех четырех метрик рассматриваются только минимальное

$$G_m^1(s) = \min_n [F_m^n(s)], \quad (10)$$

среднее

$$G_m^2(s) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N F_m^n(s), \quad (11)$$

и максимальное

$$G_m^3(s) = \max_n [F_m^n(s)] \quad (12)$$

значения каждой метрики между наборами СС, где m – номер анализируемой метрики, n – номер набора СС, N – число наборов.

Введенные выше метрики описывают отношение отклонения напряжения от среднего между наборами к осредненному значению напряжения течения. В случае, если эти метрики увеличиваются, можно говорить о значительном влиянии неопределенности выбора активных систем скольжения, так как, учитывая, что в реальных процессах обработки пластические деформации достигают сотен процентов, в определенный момент погрешность, вызванная случайным выбором активных систем скольжения, может превысить задаваемую исследователем. Если же метрики уменьшаются, то влияние можно принять незначительным.

Как можно видеть из результатов расчетов, приведенных на рис. 3, наблюдается практически монотонный рост отклонений напряжений; аналогичный рост наблюдается по всем метрикам и экспериментам. Это говорит о возрастающем с ростом деформации влиянии неопределенности выбора активных СС на результаты моделирования.

Отдельного рассмотрения заслуживает эксперимент на сложное нагружение. В нем сначала образец подвергался простому сдвигу до 6 % сдвиговых деформаций, а затем – одноосному растяжению до 50 % накопленных деформаций. При сложном нагружении наблюдается скачок в отклонении по всем метрикам. Вызван он изменением направления деформирования, следствием чего является активация новых СС и деактивация старых.

Проведены также численные эксперименты с отключенной ротацией кристаллитов. В этом случае неопределенность практически не оказывает влияния на тензор напряжений Коши макроуровня (рис. 4). Вызвано это тем, что попадание в вершины поверхности течучести порядка выше 5-го происходит только один раз и только в нескольких зернах. Из-за

отсутствия ротации зерна изображающая точка в пространстве напряжений при попадании в вершину текучести не меняет своего положения в дальнейшем. По этой причине влияние неопределенности на тензор напряжений Коши оказывается несущественным.

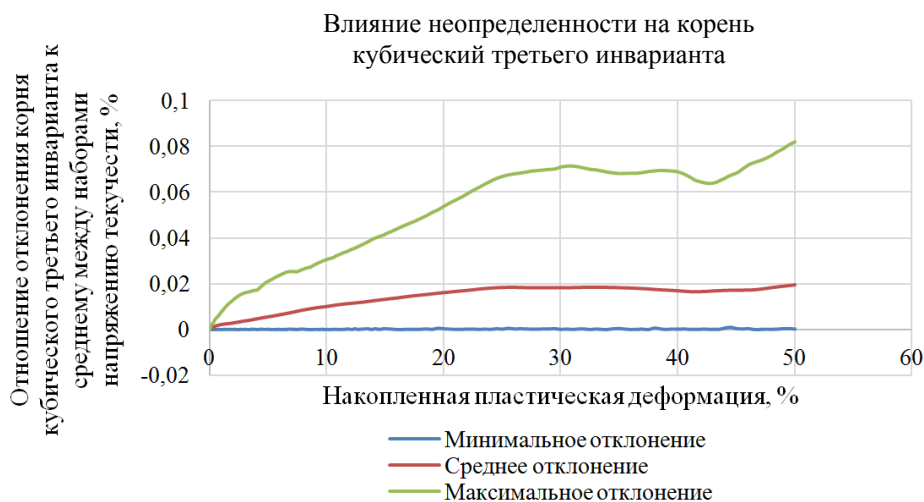


Рис. 3. Отношение минимального, среднего и максимального отклонения корня кубического 3-го инварианта тензора напряжений к среднему между реализациями напряжению текучести в зависимости от накопленной пластической деформации (эксперимент № 1)

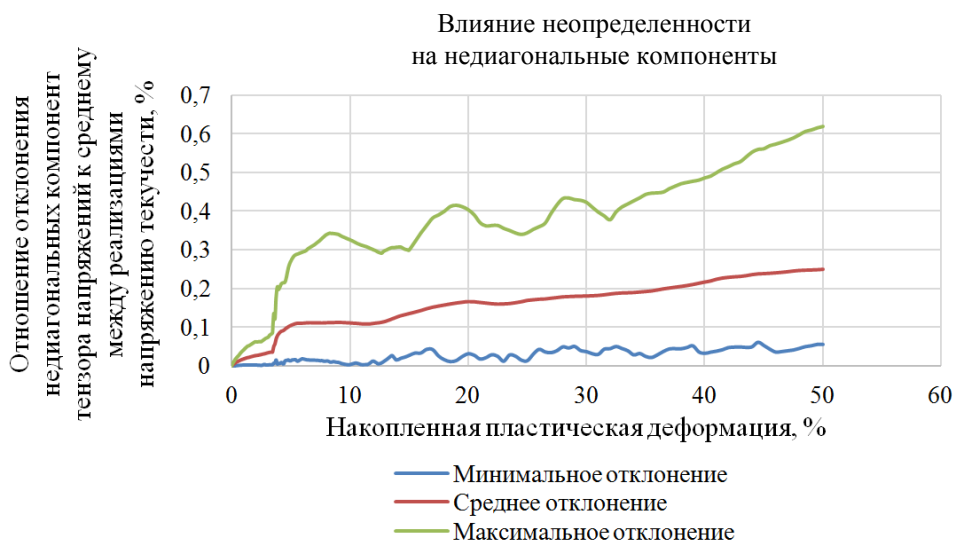


Рис. 4. Отношение минимального, среднего и максимального отклонения недиагональных компонент тензора напряжений Коши к среднему между реализациями напряжению текучести в зависимости от накопленной пластической деформации при сложном нагружении (эксперимент № 6)

Анализ влияния неопределенности на углы разориентации соседних зерен

Для определения влияния на углы разориентации между зернами необходимо ввести их раскладку в пространстве. В рамках работы для определения взаиморасположения зерен предполагается, что все зерна имеют кубическую форму, одинаковые размеры и плотно упакованы. Следует напомнить, что обычно в статистических моделях взаиморасположение зерен вообще не рассматривается, здесь оно введено только для анализа изменения разориентаций кристаллитов в процессе деформирования.

В рамках работы представительный макрообъем состоял из 512 зерен. При разбиении объема на зерна вдоль длины, ширины и высоты бралось по 8 зерен. Угол разориентации между двумя кристаллитами определяется по тензорам их ориентации относительно ЛСК в соответствии с выражением [31]:

$$d_{j,k}(s) = \arccos\left(\frac{\text{Tr}[\mathbf{O}_{(j)}^{-1}(s) \cdot \mathbf{O}_{(k)}(s)] - 1}{2}\right), \quad (13)$$

где $\mathbf{O}_{(j)}$, $\mathbf{O}_{(k)}$ – тензоры ориентации зерен j и k , s – накопленная деформация, Tr – след тензора. При этом для кристаллических твердых тел необходимо учитывать симметрию решетки. Для её учета необходима модификация соотношения (13) к виду:

$$d_{j,k}(s) = \min_{\mathbf{S} \in S^+} \left\{ \arccos\left[\frac{\text{Tr}[\mathbf{O}_{(j)}^{-1}(s) \cdot \mathbf{S} \cdot \mathbf{O}_{(k)}(s)] - 1}{2}\right] \right\}, \quad (14)$$

где \mathbf{S} – ориентационный тензор из группы симметрий (S^+) кристаллической решетки.

В рамках исследования выбор наборов активных систем скольжения определяется случайно, из-за чего изменения ориентации каждого зерна также имеет случайный характер. Для исследования влияния неопределенности на углы разориентации вводилась метрика:

$$\overline{d_{jk}}(s) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N d_{jk}^n(s),$$

$$K(s) = \frac{1}{NM} \sum_{n=1}^N \sum_{(j,k) \in B} \left| d_{jk}^n(s) - \overline{d_{jk}}(s) \right|,$$

где $\overline{d_{jk}}(s)$ – средний между выборами наборов активных систем скольжения угол разориентации между зернами j и k , $d_{jk}^n(s)$ – угол разориентации между зернами j и k при наборе активных систем скольжения n , B , M – множество пар номеров соседних зерен и общее количество пар, N – число выборов наборов активных систем скольжения. Метрика $K(s)$ задает среднее абсолютное отклонение углов разориентации между зернами в момент деформации s .

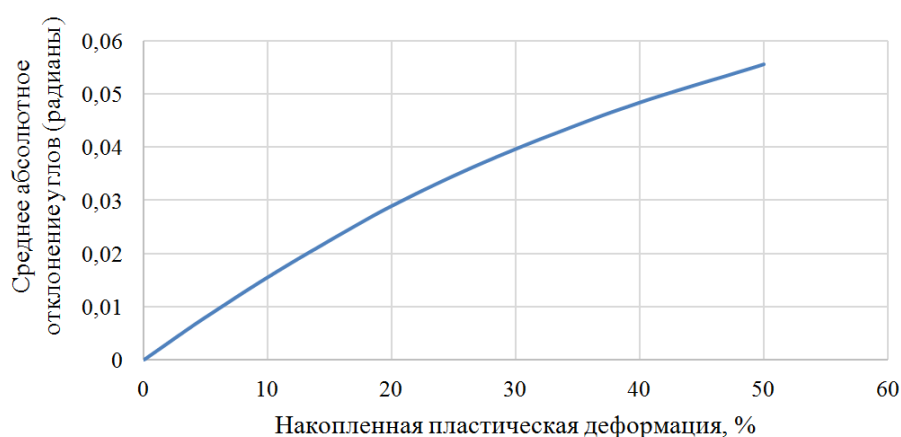


Рис. 5. Среднее абсолютное отклонение углов разориентации в зависимости от накопленной пластической деформации (эксперимент № 1)

В большинстве экспериментов $K(s)$ показывает практически монотонный рост, пример приведен на рис. 5 для первого эксперимента. Результаты расчетов демонстрируют, что с ростом деформаций растет влияние на углы разориентации между зернами, а значит, неоп-

ределенность оказывает значимое влияние на углы разориентации. Влияние на углы разориентации также может означать и влияние на количество малоугловых границ.

Показанные выше данные свидетельствуют о возрастании влияния неопределенности выбора наборов активных СС на различия углов разориентации и тензора напряжений Коши с ростом накопленной пластической деформации. Ввиду этого для применения модели Линя представляется необходимым решить проблему неопределенности в определении активных систем скольжения.

Заключение

В рамках данной работы показано, что с ростом деформации в моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла возрастает влияние неопределенности выбора активных систем скольжения на тензор напряжений макроуровня и углы разориентации между зернами, наблюдается монотонный рост отклонений указанных параметров в зависимости от случайного выбора наборов активных систем скольжения. Следует отметить, что исследование проведено для умеренных накопленных деформаций; в реальных процессах обработки металлов давлением накопленных деформации достигают сотен и тысяч процентов. Кроме того, реальные технологические процессы обработки пластическим деформированием часто реализуются по сложным траекториям деформации, которые могут породить скачки в отклонениях рассчитываемых параметров отклика материала и приводить к значительному увеличению погрешности расчетов, обусловленной неопределенностью в выборе наборов активных систем скольжения. Из вышесказанного вытекает необходимость решения рассматриваемой проблемы неопределенности в выборе набора активных систем скольжения в упругопластических конститутивных моделях типа ТБХ, что является предметом готовящейся авторами следующей публикации.

Список литературы

1. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория определяющих соотношений: учеб. пособие. Ч. II. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. гос. техн. ун-та. – 2008 – 243 с.
2. Трусов П.В., Швейкин А.И. Теория пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. национ. исслед. политехн. ун-та, 2011. – 419 с.
3. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. Crystal plasticity; Handbook of Materials Modeling / S. Yip (ed.). – Springer: Netherlands, 2005. – P.1133–1149.
4. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications / F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, D. Raabe // Acta Materialia. – 2010. – Vol. 58. – P. 1152–1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058
5. Трусов П.В., Волегов П.С., Кондратьев Н.С. Физические теории пластичности. – Пермь: Изд-во Перм. национ. исслед. политехн. ун-та, 2013. – 244с.
6. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения. — Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. – 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV
7. Lebensohn R.A., Tomé C.N., Ponte Castañeda P. Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations // Philosophical Magazine. – 2007. – Vol. 87, no. 28. – P. 4287–4322. DOI: 10.1080/14786430701432619
8. Horstemeyer M.F. Multiscale modeling: A review / J. Leszczynski and M.K. Shukla (eds.); Practical Aspects of Computational Chemistry.– Springer Science + Business Media B.V. – 2009. – P. 87–135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3_4

9. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2010. – Vol. 26. – P. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.02.008
10. A finite strain elastic–viscoplastic self-consistent model for polycrystalline materials / H. Wang, P.D. Wu, C.N. Tome, Y. Huang // *J. Mech. and Phys. Solids*. – 2010. – Vol. 58. – P. 594–612. DOI: 10.1016/j.jmps.2010.01.004
11. Roters F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p.
12. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Статистические модели // *Физическая мезомеханика*. – 2011. – Т. 14, № 4. – С. 17–28.
13. Трусов П.В., Швейкин А.И. Многоуровневые физические модели моно- и поликристаллов. Прямые модели // *Физическая мезомеханика*. – 2011. – Т. 14, № 5. – С. 5–30.
14. Watanabe I., Setoyama D. Multiscale characterization of a polycrystalline aggregate subjected to severe plastic deformation with the finite element method // *Materials Transactions. Special Issue on Advanced Materials Science in Bulk Nanostructured Metals III*. – 2016. – P. 1–7. DOI: 10.2320/matertrans. MH201514
15. Линь Т.Г. Физическая теория пластичности // *Проблемы теории пластичности. Сер. Новое в зарубежной механике. Вып. 7*. – М.: Мир, 1976. – С. 7–68.
16. Taylor G.I. Plastic strain in metals // *J. Inst. Metals*. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.
17. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses // *Phil. Mag. Ser.7*. – 1951a. – Vol.42, no. 327. – P. 414–427. DOI: 10.1080/14786445108561065
18. Bishop J.F.W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face – centered metal // *Phil. Mag. Ser.7*. – 1951b. – Vol. 42, no. 334. – P. 1298–1307. DOI: 10.1080/14786444108561385
19. Habraken A.M. Modelling the plastic anisotropy of metals // *Arch. Comput. Meth. Engng*. – 2004. – Vol. 11, no. 1. – P. 3–96. DOI: 10.1007/BF02736210
20. Havner K.S. Analysis of fcc crystals in two singular orientations in (1 1 0) channel die compression // *Mech. of Mater*. – 2010. – Vol. 42. – P. 657–672. DOI: 10.1016/j.mechmat.2010.04.003
21. Anand L., Kothari M. A computational procedure for rate independent crystal plasticity // *J. Mechanics and Physics of Solids*. – 1996. – Vol. 44, no. 4. – P. 525–558. DOI: 10.1016/0022-5096(96)00001-4
22. McGinty R.D., McDowell D.L. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity // *Int. J. Plasticity*. – 2006. – Vol. 22. – P. 996–1025. DOI: 10.1016/j.ijplas.2005.06.002
23. Zuo Q.H. On the uniqueness of a rate-independent plasticity model for single crystals // *Int. J. Plasticity*. – 2011. – Vol. 27. – P. 1145–1164. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.12.002
24. Трусов П.В., Ашихмин В.Н., Швейкин А.И. Анализ деформирования ГЦК-металлов с использованием физической теории упругопластичности // *Физическая мезомеханика*. – 2010. – Т. 13, № 3. – С. 21–30.
25. A stochastic approach to capture crystal plasticity / L. Zhang, R. Dingreville, T. Bartel, M.T. Lusk // *Int. J. Plasticity*. – 2011. – Vol. 27. – P. 1432–1444. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.04.002
26. On the numerical integration of rate independent single crystal behavior at large strain / M.B. Bettaieb, O. Débordes, A. Dogui, L. Duchkne, C. Keller // *Int. J. Plasticity*. – 2012. – Vol. 32-33. – P. 184–217. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.10.010.
27. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains // *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*. – 2004. – Vol. 193, iss. 48–51. – P. 5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068

28. Shveykin A.I., Romanov K.A. Trusov P.V. Some Issues with Statistical Crystal Plasticity Models: Description of the Effects Triggered in FCC Crystals by Loading with Strain-Path Changes // *Materials*. – 2022. – Vol. 15 (19). DOI:10.3390/ma15196586
29. Шермергор Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред. – М.: Наука. – 1977. – 400 с.
30. Elastic constants of aluminum / J. Vallin, M. Mongy, K. Salama, O. Beckman // *Journal of Applied Physics*. – 1964. – Vol. 35, no.6. – P. 1825–1826. DOI:10.1063/1.1713749
31. Ivanova T.M., Savyolova T.I., Sypchenko M.V. The modified component method for calculation of orientation distribution function from pole figures // *Inverse Probl. Sci. Eng.* – 2010. – Vol. 18. – P. 163–171. DOI: 10.1080/17415970903234943

References

1. Trusov P.V., Shveykin A.I. Teoriya opredelyayushchikh sootnosheniy: ucheb. posobiye. Ch.II. Teoriya plastichnosti [Theory of constitutive relations. Part II. Theory of plasticity]. Perm, Izdatelstvo permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta, 2008, 243 p.
2. Trusov P.V., Shveykin A.I. Teoriya plastichnosti [Theory of plasticity]. Perm, Izdatelstvo permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta, 2011, 419 p.
3. Horstemeyer M.F., Potirniche G.P., Marin E.B. Handbook of Materials Modeling. Springer. Netherlands, 2005, pp.1133–1149.
4. F. Roters, P. Eisenlohr, L. Hantcherli, D.D. Tjahjanto, T.R. Bieler, D. Raabe Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 2010, vol. 58, pp.1152–1211. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.10.058
5. Trusov P.V., Volegov P.S., Kondratyev N.S. Fizicheskiye teorii plastichnosti [Physical theories of plasticity]. Perm, Izdatelstvo permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta, 2013, 244 p.
6. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevyye modeli mono- i polikristallicheskich materialov: teoriya. algoritmy. primery primeneniya [Multilevel models of single- and polycrystalline materials: theory, algorithms, application examples]. Novosibirsk, Izdatelstvo sibirskogo otdeleniya Rossiyskoy akademii nauk, 2019, 605 p. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV
7. Lebensohn R.A., Tomé C.N., Ponte Castañeda P. Self-consistent modelling of the mechanical behaviour of viscoplastic polycrystals incorporating intragranular field fluctuations. *Philosophical Magazine*, 2007, vol.87, No.28, pp.4287–4322. DOI: 10.1080/14786430701432619
8. Horstemeyer M.F. Practical Aspects of Computational Chemistry. Springer Science + Business Media B.V., 2009, P.87–135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3_4
9. McDowell D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity. *Int. J. Plasticity*, 2010, Vol.26, pp.1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010.02.008
10. Wang H., Wu P.D., Tome C.N., Huang Y. A finite strain elastic–viscoplastic self-consistent model for polycrystalline materials. *J. Mech. and Phys. Solids*, 2010, vol.58, pp.594–612. DOI: 10.1016/j.jmps.2010.01.004
11. Roters F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework. RWTH Aachen, Aachen, 2011, 226 p.
12. Trusov P.V., Shveikin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Statistical models // *Physical Mesomechanics*. 2013. Vol.16. No.1. Pp.17-28. DOI: 10.1134/S1029959913010037
13. Trusov P.V., Shveikin A.I. Multilevel crystal plasticity models of single- and polycrystals. Direct models. *Physical Mesomechanics*, 2013, Vol.16, No.2, pp.99-124. DOI: 10.1134/S1029959913020021

14. Watanabe I., Setoyama D. Multiscale characterization of a polycrystalline aggregate subjected to severe plastic deformation with the finite element method. *Materials Transactions. Special Issue on Advanced Materials Science in Bulk Nanostructured Metals III*, 2016, P.1–7. DOI: 10.2320/matertrans. MH201514
15. Lin' T.G. *Fizicheskaya teoriya plastichnosti [Physical theory of plasticity]. Problemy teorii plastichnosti. Ser. Novoye v zarubezhnoy mekhanike, Vyp.7, M.: Mir, 1976, pp.7-68.*
16. Taylor G.I. Plastic strain in metals. *J. Inst. Metals*, 1938, vol.62, pp.307–324.
17. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycrystalline aggregate under combined stresses. *Philosophical Magazine, Ser.7.,1951, vol.42, No.327, pp.414–427.* DOI: 10.1080/14786445108561065.
18. Bishop J.F.W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycrystalline face – centered metal. *Philosophical Magazine, Ser.7., 1951, vol.42, No.334, pp.1298–1307.* DOI: 10.1080/ 14786444108561385
19. Habraken A.M. Modelling the plastic anisotropy of metals. *Arch. Comput. Meth. Engng.*, 2004, vol.11, No.1, pp.3-96. DOI: 10.1007/ BF02736210.
20. Havner K.S. Analysis of fcc crystals in two singular orientations in (1 1 0) channel die compression. *Mech. of Mater*, 2010, vol.42, pp.657-672. DOI: 10.1016/j.mechmat.2010.04.003
21. Anand L., Kothari M. A computational procedure for rate independent crystal plasticity. *J. Mechanics and Physics of Solids*, 1996, vol. 44, No. 4, P. 525-558. DOI: 10.1016/0022-5096(96)00001-4
22. McGinty R. D., McDowell D. L. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity. *Int. J. Plasticity*, 2006, vol. 22, pp.996-1025. DOI: 10.1016/j.ijplas.2005.06.002.
23. Zuo Q. H. On the uniqueness of a rate-independent plasticity model for single crystals. *Int. J. Plasticity*, 2011, vol. 27, pp.1145-1164. DOI: 10.1016/ j.ijplas.2010.12.002.
24. Trusov P.V., Ashihmin V.N., Shveykin A.I. Analiz deformirovaniya GTsK-metallov s ispolzovaniyem fizicheskoy teorii uprugoplastichnosti [Analysis of deformation of fcc metals using the physical theory of elasto-plasticity]. *Fizicheskaya mezomekhanika*, 2010, vol.13, № 3, pp.21-30.
25. Zhang L., Dingreville R., Bartel T., Lusk M. T. A stochastic approach to capture crystal plasticity. *Int. J. Plasticity*, 2011, vol. 27, pp.1432-1444. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.04.002
26. Bettaieb M. B. Débordes O., Dogui A., Duchkne L., Keller C. On the numerical integration of rate independent single crystal behavior at large strain. *Int. J. Plasticity*, 2012, vol.32-33, pp.184-217. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.10.010.
27. Anand L. Single-crystal elasto-viscoplasticity: application to texture evolution in polycrystalline metals at large strains. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg*, 2004, vol.193, Is.48-51, pp.5359–5383. DOI: 10.1016/j.cma.2003.12.068
28. Shveykin A.I., Romanov K.A. Trusov P.V. Some issues with statistical crystal plasticity models: description of the effects triggered in fcc crystals by loading with strain-path changes. *Materials*, 2022, vol.15(19). DOI:10.3390/ma15196586
29. Shermergor T.D. *Teoriya uprugosti mikroneodnorodnykh sred [Theory of elasticity of microinhomogeneous media]. Moscow, Nauka, 1977, 400 p.*
30. Vallin J., Mongy M., Salama K., Beckman O. Elastic constants of aluminum. *Journal of Applied Physics*, 1964, vol.35, No.6, P.1825–1826. DOI:10.1063/1.1713749
31. Ivanova T.M., Savyolova T.I., Sypchenko M.V. The modified component method for calculation of orientation distribution function from pole figures. *Inverse Probl. Sci. Eng*, 2010, vol.18, pp.163–171. DOI: 10.1080/17415970903234943