Трусов, П.В. О двухуровневых моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла для описания упругопластического деформирования поликристаллических тел: один вариант решения проблемы неопределенности выбора активных систем скольжения / П.В. Трусов, П.А. Гладких. – DOI: 10.15593/perm.mech/2024.4.06 // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика. – 2024. – № 4. – С. 56–69.

Perm Polytech Style: Trusov P.V., Gladkikh P.A. On Two-Level Models of the Taylor – Bishop – Hill Type for Describing the Elastoplastic Deformation of Polycrystalline Bodies: One Option for Solving the Problem of Uncertainty in the Choice of Active Slip Systems. *PNRPU Mechanics Bulletin,* 2024, no. 4, pp. 56-69. DOI: 10.15593/perm.mech/2024.4.06

пермский политех

**ВЕСТНИК ПНИПУ. МЕХАНИКА**

**№ 4, 2024**

**PNRPU MECHANICS BULLETIN**

https://ered.pstu.ru/index.php/mechanics/index

Научная статья

DOI: 10.15593/perm.mech/2024.4.06
УДК 539.3

# О ДВУХУРОВНЕВЫХ МОДЕЛЯХ ТИПА ТЕЙЛОРА – БИШОПА – ХИЛЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТЕЛ: ОДИН ВАРИАНТ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМЫ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ВЫБОРА АКТИВНЫХ СИСТЕМ СКОЛЬЖЕНИЯ

**П.В. Трусов, П.А. Гладких**

Пермский национальный исследовательский политехнический университет, Пермь, Российская Федерация

О СТАТЬЕ

Получена: 02 августа 2024 г.
Одобрена: 23 августа 2024 г.
Принята к публикации:
18 сентября 2024 г.

*Ключевые слова:*

двухуровневые модели типа Тейлора – Бишопа – Хилла, проблема неопределенности выбора наборов активных систем скольжения, вариант физически обоснованного решения проблемы неопределенности.

АННОТАЦИЯ

Одной из первых двухуровневых физически-ориентированных моделей, предназначенных для описания пластического деформирования, была жесткопластическая модель Дж.И. Тейлора, математическое обоснование которой впоследствии представлено в работах Дж. Бишопа и Р. Хилла. Различные варианты моделей, базирующихся на основных положениях этих пионерских работ, в литературе принято называть моделями типа Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ). Несмотря на распространенность моделей типа ТБХ, они не лишены недостатков (наличие связи – условие несжимаемости, неопределенность выбора набора из пяти систем скольжения при выполнении условия активации шести систем и более). Учет упругих деформаций, введенный в появившейся позднее модели Т.Г. Линя, позволил преодолеть недостаток, связанный с наличием связи; при этом появилась возможность реализации упругопластической деформации при активации менее пяти систем скольжения. Однако важнейший недостаток – неопределенность выбора набора активных систем скольжения, – сохранился. Следует подчеркнуть, что ограничение числа систем скольжения пятью при попадании изображающей точки в пространстве напряжений в вершину более высокого, чем пятый, порядка обусловлено только процедурой нахождения скоростей (или приращений) сдвигов и напряжений. Физического обоснования такого ограничения не существует.

В связи с этим начиная с 70-х гг. XX в. наиболее широкое распространение получили двухуровневые упруговязкопластические (т.е. чувствительные к скорости деформации) модели; было показано, что при стремлении параметра скоростной чувствительности к нулевому значению получаемое решение сходится к решению упругопластической модели. Однако в этом случае система уравнений конститутивной модели становится жесткой, что приводит к необходимости использования неявных схем интегрирования и существенному снижению вычислительной эффективности. Учитывая данное обстоятельство, были предприняты многочисленные попытки освободиться от указанного важнейшего недостатка моделей типа ТБХ, однако известные авторам варианты сводятся к различным математическим процедурам, не имеющим должного физического обоснования.

В настоящей работе предлагается вариант физически обоснованной упругопластической модели, использующий основные положения моделей типа ТБХ, но свободный от отмеченных выше недостатков. При одновременной активации более 5 систем скольжения все они принимаются «равноправными» для реализации пластического деформирования сдвигами. Для определения скоростей (приращений) сдвигов по всем потенциально активным в рассматриваемый момент деформирования системам скольжения предлагается итерационная процедура.

© **Трусов Петр Валентинович** – д. ф.-м. н., проф., зав. кафедрой математическое моделирования систем и процессов, e-mail tpv@matmod.pstu.ac.ru, iD: 0000-0001-8997-5493
**Гладких Павел Андреевич** – м. н. с., лаборатория многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, e-mail: gladkikh.p@yandex.ru, iD: 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, iD: 0000-0001-8997-5493.
**Pavel A. Gladkikh** – Junior Researcher, Laboratory of Multilevel Modeling of Structural and Functional Materials, e-mail: gladkikh.p@yandex.ru, iD: 0009-0004-9635-0191.

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

# ON TWO-LEVEL MODELS OF THE TAYLOR – BISHOP – HILL TYPE FOR DESCRIBING THE ELASTOPLASTIC DEFORMATION OF POLYCRYSTALLINE BODIES: ONE OPTION FOR SOLVING THE PROBLEM OF UNCERTAINTY IN THE CHOICE OF ACTIVE SLIP SYSTEMS

**P.V. Trusov, P.A. Gladkikh**

Perm National Research Polytechnic University, Perm, Russian Federation

ARTICLE INFO

Received: 02 August 2024
Approved: 23 August 2024
Accepted for publication:
18 September 2024

*Keywords:*
two-level models of the Taylor – Bishop – Hill type, the problem of uncertainty in the choice of sets of active slip systems, a variant of a physically based solution to the problem of uncertainty.

ABSTRACT

One of the first two-level physically oriented models intended to describe plastic deformation was the rigid-plastic model of J.I. Taylor, the mathematical justification of which was subsequently presented in the works of J. Bishop and R. Hill. Various versions of models based on the main provisions of these pioneering works are usually called in the literature models of the Taylor – Bishop – Hill (TBH) type. Despite the prevalence of TBH-type models, they have disadvantages (the presence of a constraint (connection), which is the condition of incompressibility, the uncertainty of choosing a set of five slip systems when the condition of activation of six or more systems is met). Taking into account elastic deformations, introduced in the later model of T.G. Lin, made it possible to overcome the disadvantage associated with the presence of a constraint. At the same time, it became possible to realize elastic-plastic deformations when less than five slip systems are activated. However, the most important disadvantage is the uncertainty in choosing a set of active slip systems – remains. It should be emphasized that the limitation of the number of slip systems to five when the representing point in the stress space hits a vertex of a higher order than the fifth is due only to the procedure for solving the velocities (or increments) of shears and stresses. There is no physical justification for such a limitation.

In this regard, since the 70s of the twentieth century, two-level elastoviscoplastic (i.e., strain rate-dependent) models have become most widespread. It was shown that when the velocity sensitivity parameter tends to zero, the resulting solution converges to the solution of the elastoplastic model. However, in this case, the system of equations of the constitutive model becomes rigid, which leads to the need to use implicit integration schemes and a significant decrease in computational efficiency. Taking this circumstance into account, numerous attempts have been made to get rid of this most important disadvantage of TBH-type models, however, the options known to the authors are reduced to various mathematical procedures that do not have proper physical justification.

In this work, we propose a version of a physically based elastic-plastic model that uses the basic provisions of TBH-type models, but is free from the disadvantages noted above. When more than 5 slip systems are simultaneously activated, they are all considered “equal in rights” for the implementation of plastic deformation by shear. An iterative procedure is proposed to determine the rates (increments) of shears for all slip systems that are potentially active at the moment of deformation under consideration.

Изделия из металлов и сплавов, несмотря на широкое внедрение полимерных и композиционных материалов, продолжают оставаться наиболее востребованными в различных отраслях промышленности. Непрерывно обновляющийся ассортимент сплавов и деталей из них, постоянно возрастающие требования к повышению эксплуатационных характеристик изделий, необходимость быстрой разработки технологий (в большинстве случаев – методами пластического деформирования) изготовления последних требуют создания математических моделей (ММ) для описания процессов термомеханической обработки (ТМО). «Сердцевиной» таких ММ, определяющими их адекватность и точность, являются используемые при их формулировке конститутивные модели (КМ) (определяющие соотношения (ОС)).

Следует отметить, что краевые задачи, возникающие при исследовании технологических процессов пластической обработки металлов и сплавов, как правило, являются физически и геометрически нелинейными. Кроме того, данные задачи относятся к контактным проблемам, в которых априори неизвестны занимаемые исследуемыми телами области и их границы (включая области контакта с обрабатывающим инструментом). В связи с этим задачи данного класса рассматриваются обычно либо в приращениях, либо в скоростях; естественно, при этом и ОС необходимо формулировать в приращениях или скоростях.

Для описания процессов обработки металлов и сплавов давлением (ОМД) до настоящего времени широко распространены ММ, основанные на классических теориях пластичности [1–5], используемые в том числе во многих коммерческих пакетах прикладных программ. Модели данного класса позволяют определять поля деформаций, напряжений, температур в исследуемых областях заготовок и инструментов, энергетические характеристики процессов обработки. Однако, как известно, физико-механические свойства материалов, а следовательно, и эксплуатационные характеристики изделий, определяются главным образом их мезо- и микроструктурой. К сожалению, классические теории пластичности (упруговязкопластичности, ползучести и т. д.) не позволяют явным образом описывать эволюционирующую структуру материалов.

В связи с указанным обстоятельством в XX в. возник альтернативный подход, основанный на введении внутренних переменных [6–13], под которыми в настоящее время понимаются параметры, характеризующие строение материала на различных структурно-масштабных уровнях. В рамках данного подхода появились конститутивные многоуровневые модели, основанные на физических теориях пластичности (упругопластичности, упруговязкопластичности) [14–23]. Интенсивное развитие КМ данного класса получили начиная с 70-х гг. XX в. в связи с появлением высокопроизводительных ЭВМ.

Первой двухуровневой КМ является предложенная Дж.И. Тейлором модель [14], математическое обоснование которой приведено в статьях Дж. Бишопа и Р. Хилла [15; 16]. Различные варианты моделей, базирующихся на основных положениях этих пионерских работ, в литературе принято называть моделями типа Тейлора – Бишопа – Хилла (ТБХ). Несмотря на распространенность моделей типа ТБХ, они не лишены недостатков. Исходная модель ТБХ основана на предположении о жесткопластическом поведении материала, что обусловливает возникновение связи – несжимаемости материала, поскольку пластические деформации, реализуемые сдвигами, не должны приводить к изменениям объема. Как известно, для материалов со связями определить отклик (напряжения) только по движению (деформациям) невозможно (К. Трусделл [24]). Для случая изохоричности материала по деформациям определяется только девиатор напряжений, при этом для определения всех компонент девиатора напряжений требуется пять уравнений.

В моделях типа ТБХ решение (величины сдвигов на системах скольжения, компоненты девиатора напряжений) ищется в вершинах многогранника текучести порядка не ниже пятого; при этом для реализации произвольной деформации количество активных систем скольжения должно быть не менее пяти. Число независимых систем скольжения не может превышать числа базисных тензоров в девиаторном пространстве, которое равно пяти; в качестве базисных в моделях ТБХ используются любые пять линейно независимых ориентационных тензоров систем скольжения. Однако таких наборов базисных тензоров существует значительное (конечное) множество, что порождает известную проблему неединственности определения набора пяти активных систем скольжения и сдвигов по ним. Для преодоления данной трудности Тейлором было предложено использовать принцип минимума мощности диссипации, согласно которому из всех потенциально возможных (т. е. удовлетворяющих критерию Шмида активации) наборов из 5 систем скольжения (СС) действительным является доставляющий минимум мощности работы касательных напряжений на сдвигах по этим системам. При использовании изотропного закона упрочнения из него следует принцип минимума суммарного сдвига по активным СС. В цитируемых выше работах Бишопа и Хилла приведено доказательство данного принципа, однако при этом число возможных СС не ограничивается пятью. Однако при числе активных СС, превышающем пять, предписанное приращение (или скорость) деформации может быть реализовано бесконечным множеством способов в силу линейной зависимости совокупности ориентационных тензоров активных СС.

При постановке задачи в скоростях или приращениях сдвигов по системам скольжения ее можно рассматривать как проблему линейного программирования, решения которой определяются в вершинах многогранника ограничений. В связи с этим в моделях типа ТБХ решение ищется в вершинах многогранника текучести порядка не ниже пятого, при этом количество уравнений должно быть в точности равно пяти. В то же время в кристаллитах, как правило, существуют вершины порядка выше пятого; например, в ГЦК кристаллах в отсчетной естественной конфигурации имеются вершины 6-го и 8-го порядков. Системы скольжения, образующие такие вершины, обладают «равными правами» быть признанными активными в рассматриваемый момент деформирования. Данное обстоятельство обусловливает второй, и это наиболее важный недостаток моделей типа ТБХ – неопределенность выбора наборов активных систем скольжения, число которых должно быть равно пяти. Как показано в некоторых работах, в зависимости от выбора наборов активных СС изменяются результаты решения задач исследования деформирования моно- и поликристаллических образцов [25; 26].

Позднее появилась работа Т.Г. Линя [27], в которой были учтены упругие деформации, и тем самым преодолены недостатки, связанные с наличием связи (несжимаемости) и возможностью реализации упругопластической деформации при активации менее пяти систем скольжения. Однако важнейший недостаток – неопределенность выбора набора активных систем скольжения – сохранился. Следует подчеркнуть, что ограничение числа систем скольжения пятью при попадании изображающей точки в пространстве напряжений в вершину более высокого, чем пятый, порядка обусловлено только процедурой нахождения скоростей (или приращений) сдвигов и напряжений. Физического обоснования такого ограничения не существует.

От этого ограничения свободны появившиеся в 70-х гг. XX в. двухуровневые упруговязкопластические (т.е. чувствительные к скорости деформации) модели [27–34]. Было показано, что при стремлении параметра скоростной чувствительности к нулевому значению получаемое решение сходится к решению упругопластической модели [35; 36]. Однако в этом случае система уравнений конститутивной модели становится жесткой, что приводит к необходимости использования неявных схем интегрирования и существенному снижению вычислительной эффективности [36; 37]. Учитывая данное обстоятельство, были предприняты многочисленные попытки освободиться от указанного важнейшего недостатка моделей типа ТБХ.

К наиболее простым методам решения проблемы неопределенности относятся такие, как случайный выбор систем скольжения [38], использование среднего по всем возможным наборам сдвигов по активным СС [39], определение активных систем скольжений через внесение случайных возмущений в критические напряжения [40], выбор 5 активных систем скольжения по величине запасенной на них энергии [41], итерационная процедура выбора 5 СС, обеспечивающих максимальный вклад при разложении тензора деформации скорости по тензорам ориентации СС [42], применение обобщенной обратной (или псевдообратной) матрицы для решения системы уравнений, из которой определяются скорости сдвигов [36; 43–48].

Еще один вариант решения данной проблемы связан с модификацией закона упрочнения. В работах [49; 50] рассматриваются условия единственности решения задачи определения сдвигов в зависимости от вида используемого закона упрочнения. Показано, что если матрица модулей упрочнения $H_{ij}$ является положительно полуопределенной, то имеет место единственность при определении зависимости скорости напряжений от скорости деформаций, но при этом не будет единственности в определении скоростей сдвигов (т. е. текстура также будет определяться неоднозначно). Если же матрица является положительно определенной, то будет существовать единственное решение задачи определения скоростей сдвигов. Аналогичный подход к решению рассматриваемой проблемы неединственности использован в работах [51; 52]. Однако в цитируемых работах не обсуждаются вопросы выбора наборов активных СС, определения скоростей сдвигов на них; при этом неявным образом предполагается, что активными являются одновременно не более 5 СС. Кроме того, законы упрочнения зависят от свойств конкретных материалов, их нельзя «приспосабливать» к математическим процедурам.

В некоторых работах для преодоления рассматриваемого недостатка моделей типа ТБХ используют энергетические соображения. Например, в работе [53] предлагается использовать условие минимума мощности работы на пластических деформациях по отношению к интенсивности накопленной деформации. В [54] для определения на шаге нагружения наилучшего набора приращений сдвигов по потенциально активным СС использовано дополнительное условие, по терминологии авторов – «минимальности второго порядка» работы на пластических деформациях, т.е. $\Delta(\Delta \mathrm{A}) = \Delta\left(\sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{M}^{(k)} \Delta\gamma^{(k)}\right) \rightarrow \min$, где $\Delta \mathrm{A}$ – приращение работы на шаге нагружения, $\Delta\gamma^{(k)}$ – приращение сдвига по $k$-й системе скольжения, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений Коши, $\mathbf{M}^{(k)}$ – ориентационный тензор $k$-й СС. Строгого доказательства данной гипотезы не приводится, однако авторы на ряде примеров (стесненной осадки монокристаллов при различных ориентациях, прокатки крупнозернистого поликристаллического алюминиевого образца) показывают удовлетворительное соответствие экспериментальным данным результатов расчета с использованием модифицированной модели типа ТБХ. Сопоставление результатов расчетов с помощью указанного выше подхода с экспериментальными данными и расчетными результатами с использованием других методов для случаев стесненной осадки трикристалла и листовой прокатки крупнозернистых алюминиевых образцов рассмотрено в [25].

В [55] для преодоления неоднозначности определения набора активных СС в моделях типа ТБХ предлагается численная процедура максимизации лагранжиана (мощности напряжений на пластических деформациях). В лагранжиан введены два дополнительных члена; первый из них, введенный с множителями Лагранжа, отвечает за выполнение условия пластичности. Второй член, используемый для регуляризации процедуры максимизации, вводится как штрафная функция (при превышении действующим напряжением величины напряжения течения) с параметром штрафа, роль которого играет фиктивная вязкость; этот член отвечает за выполнение условия согласованности пластического деформирования. Для реализации модели используется неявная схема Эйлера и итерационная процедура Ньютона – Рафсона. В то же время отмечается, что однозначное определение скоростей сдвигов невозможно из-за линейной зависимости соотношений, устанавливающих ограничения. Для их вычисления используется специальный алгоритм, названный автором «псевдообратным».

В развитие данного подхода в [56] предлагается два алгоритма, основанные на инкрементальных вариационных принципах, из минимизации которых следуют как балансовые уравнения (сохранения количества движения), так и определяющие соотношения. Для выполнения условия продолжающегося активного нагружения используется метод проектирования напряжений на многогранник текучести (the return-mapping scheme) или ее аналог. Для решения проблемы вырожденности системы ограничений и неединственности решения применяются регуляризация и метод штрафных функций. С математической точки зрения определение искомых переменных на каждом шаге нагружения сводится к решению нелинейной задачи оптимизации (или нелинейного программирования). Следует отметить, что решение задачи существенно зависит от назначения параметров алгоритма (регуляризации, множителя штрафной функции), для определения которых не приведены физически обоснованные критерии.

Принцип максимума мощности на скоростях сдвигов для определения наборов активных СС на каждом шаге нагружения при использовании упругопластической модели предлагается использовать также в работе [57]. Результаты расчетов для деформирования поликристалла с ГЦК решеткой сопоставляются с данными, полученными с помощью упруговязкопластической модели со степенным законом вязкопластичности и высоким показателем степени. Отмечается, что результаты оказываются близкими для случая только деформационного упрочнения, однако при существенном латентном упрочнении имеет место некоторое их различие.

Еще одним приемом, заимствованным из макрофеноменологических теорий пластичности, является замена сингулярной поверхности (многогранника) текучести гладкой поверхностью [58–62]. При использовании данного приема упругопластическая модель является аналогом упруговязкопластической КМ.

Исходя из приведенного краткого обзора работ, посвященных решению проблемы неединственности выбора набора активных СС в моделях типа ТБХ (физических упругопластических теорий), можно констатировать, что на настоящий момент не существует общепринятого подхода к ее решению. В значительной части работ делаются попытки обосновать выбор набора из не более чем пяти активных СС. В публикациях, в которых допускается одновременная активация большего числа СС, определение скоростей (или приращений) сдвигов основано на сложных математических процедурах, не имеющих должного физического обоснования.

Как представляется, основной проблемой является несоответствие размерности пространства, в котором разыскиваются скорости или приращения сдвигов (по сути – пятимерное пространство девиаторов напряжений Коши), и пространства девиаторов пластической составляющей градиента скорости (или приращения) перемещений, размерность которого равна восьми. Следует отметить, что из определения напряжений Коши не следует его симметрии. При наличии упругого закона, записанного в терминах несимметричных мер напряжений и деформаций, для рассматриваемой проблемы неединственности просто нет места, однако на сегодняшний день такие формулировки аналога закона Гука отсутствуют [63].

В настоящей работе предлагается возможный вариант преодоления указанного недостатка упругопластических моделей типа ТБХ, опирающийся на хорошо известные положениях физических теорий пластичности. Рассматривается двухуровневая статистическая конститутивная упругопластическая модель для описания поведения представительного макрообъема (моно- или поликристаллического тела). Для построения КМ используются закон Шмида, любой из возможных законов упрочнения для систем скольжения, гипоупругий закон, разложение движения на квазитвердое и деформационное. В силу нелинейности конститутивной модели для ее реализации используется пошаговая процедура (по времени или неубывающему параметру). В текущий момент нагружения активность СС определяется по условию Шмида, при этом независимо от числа активируемых систем все они принимаются «равноправными». Для определения скоростей (приращений) сдвигов на каждом шаге нагружения наряду с гипоупругим соотношением и законом упрочнения предлагается применение итерационной процедуры, использующей разложение пластической составляющей меры скорости деформации по линейно независимым диадам систем скольжения («косоугольному базису» пространства несимметричных девиаторов). Максимальное число базисных диад при этом равно восьми. Следует отметить, что в силу последнего превышение числа одновременно активных систем скольжения (равное порядку вершин многогранников текучести) размерности пространства (т. е. 8) независимо от типа решетки представляется маловероятным. В известных авторам работах по физическим теориям упругопластичности примеров многогранников текучести с вершинами порядка выше восьмого не встречалось.

## Базовая двухуровневая упругопластическая модель

Процессы обработки металлов и сплавов методами пластической деформации реализуются, как правило, в условиях больших градиентов перемещений, при этом необходимо учитывать граничные условия контактного типа. В связи с этим краевые задачи, возникающие при исследовании указанных процессов, относятся к классу геометрически и физически нелинейных, что требует формулировки специфических конститутивных моделей (КМ). Одной из основных сложностей построения КМ является разложение движения на квазитвердое и деформационное [64]; для континуума эта проблема до настоящего времени не имеет однозначного решения. Возможный вариант такого разложения для кристаллических тел предложен ранее в работах [23; 65; 66]. Для решения геометрически нелинейных контактных задач удобно применять постановки в скоростной форме, а при решении – использовать пошаговые (по времени или возрастающему параметру) процедуры.

Рассматриваемая КМ представляет собой скоростной аналог модели Линя [27], включает подмодели двух структурно-масштабных уровней; на макроуровне рассматривается отклик представительного макрообъема (монокристалла или поликристаллического агрегата, содержащего достаточное для статистического осреднения число кристаллитов), на мезоуровне – кристаллитов (зерен, субзерен, фрагментов). Для упрощения описания модели рассматривается случай изотермического нагружения. Рассмотрение поведения материала на верхнем уровне ведется в терминах механических переменных – тензоров напряжений, деформаций и их скоростей, удовлетворяющих требованию независимости от выбора системы отсчета [24; 64]. На мезоуровне описание процесса деформирования ведется в терминах дискретно-континуальных переменных – скоростей сдвигов, касательных напряжений, мер искажения и тензоров ротации решетки кристаллитов. Основным механизмом неупругого деформирования полагается движение краевых дислокаций по системам скольжения, положение которых известно для каждого типа кристаллической решетки. «Родственные» переменные обозначаются одинаковыми буквами, на макроуровне – прописными, на мезоуровне – строчными. Для связи подмоделей мезо- и макроуровней применяется обобщенная гипотеза Фойгта, операции осреднения тензоров напряжений, упругих свойств, спина, пластической части тензора деформации скорости.

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

$$\begin{cases} \mathbf{\Sigma}^r = \mathbf{\Pi} : \mathbf{Z}^e = \mathbf{\Pi} : \left(\mathbf{Z} - \mathbf{Z}^p\right), \\ \mathbf{\Sigma}^r = \dot{\mathbf{\Sigma}} - \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Sigma} + \mathbf{\Sigma} \cdot \mathbf{\Omega}, \\ \mathbf{L} = (\hat{\nabla}\mathbf{V})^T = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1}, \\ \mathbf{Z} = \mathbf{L} - \mathbf{\Omega}, \\ \mathbf{\Sigma} = <\boldsymbol{\sigma}>, \\ \mathbf{\Pi} = <\boldsymbol{\pi}>, \\ \mathbf{\Omega} = <\boldsymbol{\omega}>, \\ \mathbf{Z}^{\mathrm{p}} = <\mathbf{z}^p>. \end{cases} \tag{1}$$

где $\mathbf{\Sigma}$ – тензор напряжений макроуровня, $r$ – обозначение коротационной производной, $\dot{(\ )}$ – обозначение материальной производной по времени, $\mathbf{\Pi}$ – тензор упругих свойств макроуровня, $\mathbf{Z}$, $\mathbf{Z}^e$, $\mathbf{Z}^p$ – несимметричная индифферентная мера скорости деформации макроуровня, ее упругая и пластическая составляющие, соответственно, $\mathbf{F}$ – аффинор деформаций (транспонированный градиент места), $\mathbf{L} = (\hat{\nabla}\mathbf{V})^T$ – транспонированный градиент скорости перемещений макроуровня ($\hat{\nabla}$ – набла-оператор, определенный в актуальной конфигурации, $\mathbf{V}$ – вектор скорости перемещений), $\mathbf{\Omega}$ – спин макроуровня, $\boldsymbol{\omega}$ – спин жесткой подвижной системы координат, связанной с решеткой кристаллитов [65; 66], $<\cdot>$ – обозначение операции осреднения по представительному объему макроуровня.

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

$$\begin{cases} \boldsymbol{\sigma}^r = \boldsymbol{\pi} : \mathbf{z}^e = \boldsymbol{\pi} : \left(\mathbf{z} - \mathbf{z}^p\right), \\ \boldsymbol{\sigma}^r = \dot{\boldsymbol{\sigma}} - \boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\omega}, \\ \mathbf{L} = \mathbf{l}, \\ \mathbf{z} = \mathbf{l} - \boldsymbol{\omega} = \mathbf{z}^e + \mathbf{z}^p \\ \mathbf{z}^p = \sum\limits_{k=1}^{K} \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}, \\ \mathbf{m}^{(i)} : \boldsymbol{\pi} : (\mathbf{z} - \mathbf{z}^p) = \dot{\tau}_c^{(i)}, i = \overline{1, K}, \\ \boldsymbol{\omega} = \mathbf{I} \times (\mathbf{k}_3\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_2\mathbf{k}_1\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}_3) : (\mathbf{l} - \mathbf{z}^p), \\ \dot{\mathbf{o}} \cdot \mathbf{o}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{\omega}, \end{cases} \tag{2}$$

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, определяемые принятой моделью упрочнения (см. ниже); $\mathbf{m}^{(k)}=\mathbf{b}^{(k)}\mathbf{n}^{(k)}$ – ориентационный тензор $k$-й системы скольжения; $\mathbf{b}^{(k)}$ – единичный вектор в направлении вектора Бюргерса $k$-й системы скольжения; $\mathbf{n}^{(k)}$ – единичная нормаль $k$-й системы скольжения; $\mathbf{o}$ – тензор ориентации кристаллита; $K$ – число СС (используется удвоенное число систем, так что в активных системах скорости сдвигов и касательные напряжения всегда положительны). Заметим, что уравнение $(2)_6$ справедливо только для активных СС (т. е. тех, для которых выполнено условие Шмида). Для разложения движения на квазитвердое и деформационное в каждом кристаллите вводится жесткая декартова подвижная система координат (ПСК) с базисом $\mathbf{k}_i$, связанная с решеткой [23; 65; 66]; при численной реализации алгоритма на мезоуровне компоненты тензоров напряжений определяются в ортонормированном базисе ПСК. Для определения спина ПСК используется модель решеточного поворота [23; 65; 66]. При задании начальных условий принимается гипотеза о естественной конфигурации.

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

$$\dot{\tau}_{\mathrm{c}}^{(k)} = \sum_{l=1}^{K} h^{(kl)}\, \dot{\gamma}^{(l)}, \quad h^{(kl)} = \left[ q_{\mathrm{1at}} + (1 - q_{\mathrm{1at}})\delta^{(kl)} \right] h^{(l)}, \\ h^{(l)} = \mathrm{h}_0 \left| 1 - \tau_c^{(l)} / \tau_s \right|^{\alpha}, k = 1, ..., K, \tag{3}$$

где $h^{(kl)}$, $q_{\mathrm{lat}}$, α, $h_0$ – параметры закона упрочнения, $\delta^{(kl)}$ – дельта Кронекера, $\tau_s$ – напряжение насыщения (для ГЦК решетки полагаются одинаковыми для всех СС).

Отсчетная конфигурация полагается естественной (ненапряженной), сдвиги полагаются нулевыми, критические напряжения определяются свойствами решетки. В качестве воздействия принимается (транспонированный) градиент скорости перемещений $\mathbf{L} = \hat{\nabla}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}$, заданный как непрерывная тензор-функция (второго ранга) времени. Определение отклика представительного макрообъема осуществляется с помощью пошаговой процедуры.

На каждом шаге решение реализуется в три этапа: 1) решение задачи в скоростях, 2) интегрирование, определение значений искомых переменных на конец шага по времени (все операции с тензорами выполняются в компонентах, определенных в базисе ПСК), 3) переопределение ориентаций базисов ПСК кристаллитов, определение тензорных переменных для всех кристаллитов с учетом ротации осей ПСК, осреднение переменных по представительному макрообъему. Более подробно алгоритм реализации базовой упругопластической модели описан в статье [26].

## Модификация модели, ориентированная на решение проблемы неопределенности выбора активных систем скольжения

Как отмечено выше, неопределенность (а следовательно, и неединственность, в определенном смысле – произвол) в выборе наборов активных систем скольжения обусловлена численной процедурой определения скоростей сдвигов в упругопластических моделях (типа модели Линя). В приведенной формулировке подмодели мезоуровня данное обстоятельство связано с решением системы уравнений $(2)_6$. Несмотря на то, что в этом уравнении используются несимметричные ориентационные диады (девиаторы) $\mathbf{m}^{(k)}$, их симметризация осуществляется неявным образом, за счет симметрии тензора упругих характеристик $\mathbf{п}$ по индексам первой и второй пар: $п_{ijkl} = п_{jikl} = п_{ijlk}$. В силу этого число линейно независимых уравнений в системе $(2)_6$ не превышает пяти.

В то же время из физических соображений все СС, для которых в текущий момент деформирования выполняется критерий Шмида, следует признать обладающими равными правами быть признанными активными, что используется при построении итерационной процедуры решения задачи. Последняя встраивается в общий алгоритм реализации двухуровневой упругопластической модели для определения скоростей сдвигов в подмодели мезоуровня на первом этапе (решение в скоростях).

Следует отметить, что при использовании жесткопластических моделей (каковой и была модель Тейлора), гипотезы Фойгта ($\mathbf{l} = \mathbf{L}$) и тензора спина $\boldsymbol{\omega}$, установленного по модели ротации Тейлора, скорости сдвигов в текущий момент деформирования при известном числе $K_{\text{A}}$ активных СС могут быть определены из системы уравнений:

$$\left(\sum_{k=1}^{K_{\text{A}}} \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma}^{(k)}\right) : \mathbf{m}^{(j)\text{T}} = \mathbf{z} : \mathbf{m}^{(j)\text{T}},\ \mathbf{z} = \mathbf{l} - \boldsymbol{\omega},\ j = \overline{1, K_{\text{A}}}. \quad (4)$$

При этом возникают дополнительные вопросы о соответствии числа уравнений для определения девиатора напряжений при $K_{\text{A}} \neq 5$, выполнении условий согласованности напряженного состояния условиям текучести, которые требуют отдельного рассмотрения, выходящего за рамки предлагаемой статьи.

Рассмотрим первый этап алгоритма реализации подмодели мезоуровня на произвольном $n$-м шаге по времени. Из решения на предыдущем шаге для момента начала $n$-го шага (для момента времени $t_n$) известны все переменные мезоуровня (накопленные сдвиги, критические напряжения, напряжения, ориентации ПСК каждого из кристаллитов). Напомним, что все операции с тензорами (напряжений, упругих характеристик) осуществляются в компонентах базисов ПСК соответствующих кристаллитов; сдвиги, скорости сдвигов, критические напряжения «привязаны» к системам скольжения, ориентационные диады которых также полностью определены в ПСК. Это позволяет перейти от коротационного дифференцирования и интегрирования к соответствующим обычным операциям.

По определенным на момент времени $t_n$ напряжениям, ориентационным тензорам и критическим напряжениям с использованием условия Шмида в рассматриваемом кристаллите устанавливается принадлежность СС к активным и проверяется линейная независимость их ориентационных тензоров (обозначим множество таких СС как A, их число – $K_{\text{A}}$). Если $K_{\text{A}} \leq 5$, то с использованием предписанного кинематического нагружения (заданного тензора $\mathbf{l} = \mathbf{L}$) реализуется обычный алгоритм модели Линя, т.е. решается система уравнений (2) и осуществляется переход к следующему кристаллиту.

Если же число активных СС в рассматриваемом кристаллите $K_{\text{A}} > 5$, то для него вычисления производятся с использованием описанной ниже итерационной процедуры. Следует отметить, что размерность пространства несимметричных девиаторов равна 8, следовательно, максимально возможное количество линейно независимых ориентационных тензоров СС также не превышает восьми. Соответственно, вершины многогранника текучести, образованные пересечением гиперплоскостей, соответствующих независимым ориентационным тензорам СС, также будут иметь восьмой порядок. Образование вершин более высокого порядка маловероятно, для этого должны выполняться специальные соответствия между (линейно зависимыми) ориентационными тензорами и значениями критических напряжений. Вследствие этого в дальнейшем предполагается, что напряженное состояние в случае активации более 5 СС соответствует вершине многогранника текучести порядка $K_{\text{A}}$, определяемой пересечением $K_{\text{A}}$ линейно независимых гиперплоскостей, так что все эти активные СС являются линейно независимыми, а в силу этого линейно независимыми являются и любые их подмножества. На каждой $q$-й итерации множество A разделяется на два линейно независимых непересекающиеся подмножества D (с размерностью $K_{\text{D}} = 5$) и U ($K_{\text{U}} = K_{\text{A}} - 5$), $\text{A} = \text{D} \cup \text{U}$, $\text{D} \cap \text{U} = \varnothing$. Правила отнесения СС к подмножествам D и U носят эвристический характер и определяются исследователем; например, можно использовать циклическую перестановку или случайный перебор систем. Возможен также вариант отнесения к множеству $\text{D}_q$ СС с максимальными отклонениями касательных напряжений от критических на конец шага нагружения, определенных на предыдущей итерации, т.е.

$$\left\{k\in \mathrm{A}\,|\,\max\,\left|\tau^{(k)}_{(q-1)}-\tau^{(k)}_{c(q-1)}\right|,\ k=\overline{1,5}\right\}\subset \mathrm{D}_q,$$
$$\tau^{(k)}_{(q-1)}=\boldsymbol{\sigma}_{(q-1)}:\mathbf{m}^{(k)}.$$

Для описания итерационной процедуры введем некоторые дополнительные обозначения:

$$\mathbf{z}^{\mathrm{p}}=\widehat{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}+\breve{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}},$$
$$\widehat{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}=\sum_{j=1}^{K_{\mathrm{D}}}\dot\gamma^{(j)}\mathbf{m}^{(j)},$$
$$\breve{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}=\sum_{j=1}^{K_{\mathrm{U}}}\dot\gamma^{(j)}\mathbf{m}^{(j)}.$$

Необходимость итерационной процедуры связана главным образом с неизвестными на шаге нагружения упругими составляющими градиента скорости перемещений $\mathbf{z}^{\mathrm{e}}$ для каждого из кристаллитов. Если $\mathbf{z}^{\mathrm{e}}$ тем или иным способом удалось бы определить, то далее можно воспользоваться системой уравнений вида (4) с заменой в них $\mathbf{z}$ на $\mathbf{z}^{\mathrm{p}}=\mathbf{z}-\mathbf{z}^{\mathrm{e}}$, после чего перейти непосредственно к системе (2), исключив из нее уравнение $(2)_6$. Однако $\mathbf{z}^{\mathrm{e}}$ на начало шага неизвестно, поэтому на первой итерации каждого шага нагружения $\mathbf{z}^{\mathrm{e}}$ полагается равным нулевому тензору. Рассмотрим итерационную процедуру для произвольной итерации $q$, полагая, что все переменные, входящие в систему уравнений (2), известны с предыдущей итерации.

На каждой $q$-й итерации производятся следующие операции:

1. Определяются пробные скорости сдвигов $\tilde{\dot\gamma}^{(k)}_{(\mathrm{q})}$ с использованием известной с предыдущей итерации пластической части несимметричной меры скорости деформации $\mathbf{z}^{\mathrm{p}}_{(q-1)}$:

$$\left(\sum_{j\in\mathrm{A}}\tilde{\dot\gamma}^{(j)}_{(q)}\mathbf{m}^{(j)}\right):\mathbf{m}^{(k)\mathrm{T}}=\mathbf{z}^{\mathrm{p}}_{(q-1)}:\mathbf{m}^{(k)\mathrm{T}},\quad k\in\mathrm{A}.$$

По пробным значениям скоростей сдвигов определяются значения касательных $\tilde\tau^{(k)}_{(q)}$ и критических $\tilde\tau^{(k)}_{c(q)}$ напряжений на СС на конец шага.

2. Определяется разделение множества активных систем скольжения на два подмножества $\mathrm{D}_q$ и $\mathrm{U}_q$. При реализации процедуры в настоящей работе использовался вариант случайного разделения множества A на подмножества $\mathrm{D}_q$ и $\mathrm{U}_q$.

3. Для СС из множества $\mathrm{U}_q$ определяется часть неупругой составляющей несимметричной меры скорости деформации по пробным скоростям сдвигов текущей итерации:

$$\breve{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}_{(q)}=\sum_{j\in\mathrm{U}_q}\tilde{\dot\gamma}^{(j)}_{(q)}\mathbf{m}^{(j)}.$$

4. Определяются скорости сдвигов $\bar{\dot\gamma}^{(j)}_{(q)}$ по 5 СС из множества $\mathrm{D}_q$ с помощью уравнения:

$$\sum_{j\in\mathrm{D}_q}\left(\mathbf{m}^{(i)}:\boldsymbol{\Pi}:\mathbf{m}^{(j)}+h^{ij}\right)\bar{\dot\gamma}^{(j)}_{(q)}=$$
$$=\mathbf{m}^{(i)}:\boldsymbol{\Pi}:(\mathbf{z}-\breve{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}_{(q)})-\sum_{k\in\mathrm{U}_q}h^{ik}\tilde{\dot\gamma}^{(k)}_{(q)},\left(i=\overline{1,5}\right)\in\mathrm{D}_q.$$

5. Определяются скорости сдвигов на конец текущей итерации с использованием релаксационной процедуры:

$$\dot\gamma^{(k)}_{(q)}=\dot\gamma^{(k)}_{(q-1)}+\beta(\bar{\dot\gamma}^{(k)}_{(q)}-\dot\gamma^{(k)}_{(q-1)}),\ k\in\mathrm{D}_q,$$
$$\dot\gamma^{(j)}_{(q)}=\dot\gamma^{(j)}_{(q-1)}+\beta(\tilde{\dot\gamma}^{(j)}_{(q)}-\dot\gamma^{(j)}_{(q-1)}),\ j\in\mathrm{U}_q,$$

где β – коэффициент релаксации, используемой для улучшения сходимости.

6. Определяются части неупругой составляющей несимметричной меры деформации по СС из множества $\mathrm{D}_q$, $\mathrm{U}_q$:

$$\widehat{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}_{(q)}=\sum_{k\in\mathrm{D}_q}\dot\gamma^{(k)}_{(q)}\mathbf{m}^{(k)},\quad \breve{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}_{(q)}=\sum_{j\in\mathrm{U}_q}\dot\gamma^{(j)}_{(q)}\mathbf{m}^{(j)}.$$

7. Определяется неупругая составляющая несимметричной меры деформации на $q$-й итерации:

$$\mathbf{z}^{\mathrm{p}}_{(q)}=\widehat{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}_{(q)}+\breve{\mathbf{z}}^{\mathrm{p}}_{(q)}.$$

8. Производится проверка нормы разности скоростей сдвигов по всем активным СС: если $\sqrt{\dfrac{\sum_{i\in\mathrm{A}}(\dot\gamma^{(i)}_{(q)}-\dot\gamma^{(i)}_{(q-1)})^2}{\mathbf{z}:\mathbf{z}^{\mathrm{T}}}}<\varepsilon$, где ε – задаваемая точность решения, то итерационная процедура на данном шаге нагружения считается завершенной и осуществляется переход к вычислениям для следующих кристаллитов; в противном случае осуществляется переход к п.1.

## Результаты тестирования предлагаемого алгоритма

Для проверки применимости предлагаемой процедуры решения проблемы неопределенности выбора наборов активных СС выбрана задача исследования квазиодноосного растяжения (до 20 %) монокристаллического образца с ГЦК решеткой (алюминий) в направлении [0 0 1]. Оси лабораторной системы координат (ЛСК) в отсчетной конфигурации приняты совпадающими с осями кристаллографической системы координат (КСК); заметим, что в данном случае оси КСК не меняют своей ориентации по отношению к осям ЛСК на протяжении всего процесса деформирования. Данный выбор обусловлен тем, что, с одной стороны, с точки зрения неопределенности выбора набора активных СС имеет место самый сложный случай, поскольку равноактивными при любых деформациях должны оставаться 8 СС. При этом в силу симметрии сдвигов по системам скольжения в этом случае спин решетки должен быть нулевым в каждый момент деформирования. С другой стороны, из симметрии решетки и принятой программы деформирования скорости сдвигов и изменения критических напряжений на каждой из активных СС должны быть идентичными (независимо от принятого закона упрочнения) [67]. В этом случае решение задачи может быть получено аналитически, что предоставляет возможность качественно проверить точность и сходимость предлагаемой итерационной процедуры.

В качестве параметров брались данные из статьи [68]:

$$q_{1\text{at}} = 2,$$
$$\tau_{c_0} = 6 \text{ (МПа)},$$
$$\tau_s = 34 \text{ (МПа)},$$
$$\alpha = 2,$$
$$\text{h}_0 = 115 \text{ (МПа)}.$$

Данные характеристики соответствуют алюминию. Основное отличие от параметров, приведенных в [68], – в показателе степени α, который в настоящей работе принят равным двум (α=2), что сделано с целью получения аналитического решения рассматриваемой тестовой задачи. В численных экспериментах для исследования влияния на сходимость итерационной процедуры используемых параметров закона упрочнения варьировался коэффициент латентного упрочнения $q_{\text{lat}}$.

Скорости сдвигов для рассматриваемого тестового примера могут быть получены аналитически из решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\mathbf{m}^{(i)} : \mathbf{п} : \mathbf{z} - \sum_{k \in A} \mathbf{m}^{(i)} : \mathbf{п} : \mathbf{m}^{(k)} \dot{\gamma} = \dot{\tau}_c,$$
$$\dot{\tau}_c = \sum_{k=1}^{K_\text{A}} h^{(ik)} \dot{\gamma}^{(k)} = \left( \sum_{k=1}^{K_\text{A}} h^{(ik)} \right) \dot{\gamma},$$
$$\tau_c(0) = \tau_{c0},$$
$$\gamma(0) = 0,$$

где $K_\text{A}$ – число активных в текущий момент деформирования систем скольжения. В приведенной системе уравнений индекс $i$ фиксирован, в качестве $i$-й СС (и соответствующего ориентационного тензора $\mathbf{m}^{(i)}$) может быть выбрана любая из 8 равноправных систем скольжения. Как отмечено выше, вследствие симметрии спин для рассматриваемого случая равен нулевому тензору **0**. В таком случае:

$$\mathbf{z} = \mathbf{l} = -\frac{\dot{\varepsilon}}{2} \mathbf{k}_1 \mathbf{k}_1 - \frac{\dot{\varepsilon}}{2} \mathbf{k}_2 \mathbf{k}_2 + \dot{\varepsilon} \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_3, \quad \dot{\varepsilon} = 0{,}0017.$$

Для упрощения записи при решении системы дифференциальных уравнений введем некоторые обозначения:

$$z = \mathbf{m}^{(i)} : \mathbf{п} : \mathbf{z},$$
$$m = \sum_{k=1}^{K_\text{A}} \mathbf{m}^{(i)} : \mathbf{п} : \mathbf{m}^{(k)},$$
$$h = \text{h}_0 (1 + 7 q_{1\text{at}}),$$
$$\sum_{k=1}^{K_\text{A}} h^{(ik)} = h \left| 1 - \tau_c / \tau_s \right|^\alpha.$$

С использованием введенных обозначений система дифференциальных уравнений принимает вид:

$$z - m\dot{\gamma} = \dot{\tau}_c,$$
$$\dot{\tau}_c = h \left| 1 - \frac{\tau_c}{\tau_s} \right|^\alpha \dot{\gamma},$$
$$\tau_c(0) = \tau_{c0},$$
$$\gamma(0) = 0.$$

Аналитическое решение данной системы уравнений имеет вид:

$$\tau_c = \tau_s - \frac{-z(c+t) + \sqrt{(z(c+t))^2 + 4\dfrac{m\tau_s^2}{h}}}{2},$$

$$\gamma_t = \frac{z}{m} t - \frac{1}{m} \left( \tau_s - \frac{-z(c+t) + \sqrt{(z(c+t))^2 + 4\dfrac{m\tau_s^2}{h}}}{2} - \tau_{c_0} \right),$$

где $c = \dfrac{m\tau_s^2}{hz(\tau_s - \tau_{c_0})} - \dfrac{\tau_s - \tau_{c_0}}{z}$.

Корректность решения подтверждена аналитической проверкой (подстановкой решения в исходные уравнения) и хорошим соответствием аналитического решения результатам, полученным численно при использовании упругопластической модели Линя в предположении равенства скоростей сдвигов по всем 8 СС.

Для оценки погрешности вводились две метрики относительно накопленных сдвигов:

$$f = \max_s \sum_{i \in A} \left| \gamma^{(i)}_{\text{модель}}(s) - \gamma^{(i)}_{\text{теория}}(s) \right|,$$
$$g = \max_s \frac{f(s)}{\sum_{i \in A} \gamma^{(i)}_{\text{теория}}(s)} = \max_s \frac{f(s)}{\gamma_\Sigma(s)},$$

где $s$ – накопленная пластическая деформация, $\gamma^{(i)}_{\text{модель}}$ – сдвиги, полученные с использованием модифицированной модели Линя, $\gamma^{(i)}_{\text{теория}}$ – теоретические сдвиги, определенные из аналитического решения, $A$ – множество активных СС. Результаты, полученные в численных экспериментах с использованием предлагаемой модифицированной упругопластической модели, проведены в таблице.

Результаты численного эксперимента
с итерационной процедурой

Results of a numerical experiment
with an iterative procedure

| Параметры | $q_{1\text{at}} = 1$ | | $q_{1\text{at}} = 2$ | |
|---|---|---|---|---|
| | $f$ | $g$ | $f$ | $g$ |
| $\beta = 1$ | $6{,}4 \cdot 10^{-6}$ | $1{,}76 \cdot 10^{-4}$ | $9{,}8 \cdot 10^{-6}$ | $3{,}31 \cdot 10^{-4}$ |
| $\beta = 0{,}75$ | $6{,}09 \cdot 10^{-6}$ | $2{,}57 \cdot 10^{-4}$ | $8{,}92 \cdot 10^{-6}$ | $4{,}22 \cdot 10^{-4}$ |
| $\beta = 0{,}5$ | $5{,}39 \cdot 10^{-6}$ | $4{,}19 \cdot 10^{-4}$ | $6{,}62 \cdot 10^{-6}$ | $4{,}37 \cdot 10^{-4}$ |
| $\beta = 0{,}25$ | $5{,}25 \cdot 10^{-6}$ | $1{,}96 \cdot 10^{-3}$ | $5{,}04 \cdot 10^{-6}$ | $1{,}6 \cdot 10^{-3}$ |

Как можно видеть из данных таблицы, итерационная процедура сходится к аналитическому решению как при использовании изотропного, так и анизотропного закона упрочнения. Уменьшение параметра релаксации улучшает сходимость итерационной процедуры. Кажущееся противоречие последнего утверждения приведенным данным для относительной погрешности $g$ обусловлено тем, что максимум этой оценки соответствует начальному участку деформирования, где значения суммарного накопленного сдвига малы.

## Заключение

Предложен новый подход, позволяющий исключить неопределенность в выборе наборов активных систем скольжения в моделях типа Тейлора – Бишопа – Хилла, в котором все потенциально активные (т.е. те, для которых в текущий момент деформирования выполняется закон Шмида) системы скольжения принимаются равноправными. Для определения скоростей сдвигов по активным системам скольжения в случае, если их число более 5, применяется итерационная процедура. Последняя основана на разделении систем скольжения на каждой итерации на 2 подмножества, имеющие линейно независимые ориентационные диады; для определения скоростей сдвигов по системам каждого из этих подмножеств используются различные соотношения. Для подмножества, включающего 5 независимых систем, скорости сдвигов определяются из системы уравнений, следующих из закона Шмида в скоростной форме. Для второго подмножества, содержащего ($K_A$–5) линейно независимых систем скольжения, скорости сдвигов устанавливаются разложением неупругой составляющей градиента скорости перемещений. Для иллюстрации предложенного подхода приведено решение тестовой задачи исследования одноосного деформирования монокристаллического образца с ГЦК решеткой при специальной ориентировке, при которой одновременно активными являются 8 систем скольжения; для данной задачи получено аналитическое решение. Показана сходимость итерационной процедуры к полученному аналитическому решению.

## Библиографический список


1. Хилл, Р. Математическая теория пластичности / Р. Хилл. – М.: Гостехиздат, 1956. – 407 с.
2. Ильюшин, А.А. Пластичность. Основы общей математической теории / А.А. Ильюшин. – М.: АН СССР, 1963. – 272 с.
3. Ильюшин, А.А. Пластичность. Ч.1. Упругопластические деформации / А.А. Ильюшин. – М.: Логос, 2004. – 388 с.
4. Васин, Р.А. Определяющие соотношения теории пластичности / Р.А. Васин // Итоги науки и техники. Сер.: Механика деформируемого твердого тела. ВИНИТИ. – 1990. – Т. 21. – С. 3–75.
5. Ишлинский, А.Ю. Математическая теория пластичности / А.Ю. Ишлинский, Д.Д. Ивлев. – Мо.: Физматлит, 2001. – 701 с.
6. Rice, J.R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity / J.R. Rice // J. Mech. Phys. Solids. – 1971. – Vol. 19. – P. 433–455. DOI: 10.1016/0022-5096(71)90010-X
7. Коларов, Д. Механика пластических сред / Д. Коларов, А. Балтов, Н. Бончева. – М.: Мир, 1979. – 302 с.
8. Можен, Ж. Механика электромагнитных сплошных сред / Ж. Можен. – М.: Мир, 1991. – 560 с.
9. McDowell, D.L. Internal state variable theory / D.L. McDowell // In: Handbook of Materials Modeling, S. Yip (ed.). – Springer, 2005. – P. 1151–1169. DOI: 10.1007/978-1-4020-3286-8_58
10. Ашихмин, В.Н. Конститутивные соотношения с внутренними переменными: общая структура и приложение к текстурообразованию в поликристаллах / В.Н. Ашихмин, П.С. Волегов, П.В. Трусов // Вестник Пермского государственного технического университета. Математическое моделирование систем и процессов. – 2006. – № 14. – С. 11–26.
11. Определяющие соотношения и их применение для описания эволюции микроструктуры / П.В. Трусов [и др.] // Физическая мезомеханика. – 2009. – Т.12, №3. – С. 61–71.
12. Horstemeyer, M.F. Historical review of internal state variable theory for inelasticity / M.F. Horstemeyer, D.J. Bammann // Int. J. Plasticity. – 2010. – Vol. 26. – P. 1310–1334. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010. 06.005
13. Maugin, G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893–2013) / G.A. Maugin // Mechanics Research Communications. – 2015. – Vol. 69. – P.79–86. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00
14. Taylor, G.I. Plastic strain in metals / G.I. Taylor // J. Inst. Metals. – 1938. – Vol. 62. – P. 307–324.
15. Bishop, J.F. A theory of the plastic distortion of a polycristalline aggregate under combined stresses / J.F. Bishop, R. Hill // Phil. Mag. Ser.7. – 1951. – Vol. 42, no. 327. – P. 414–427. DOI: 10.1080/14786445108561065
16. Bishop, J.F.W. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycristalline face – centered metal / J.F.W. Bishop, R. Hill // Phil. Mag. Ser.7. – 1951. – Vol. 42, no.334. – P. 1298–1307. DOI: 10.1080/ 14786444108561385
17. Лихачев, В.А. Структурно- аналитическая теория прочности / В.А. Лихачев, В.Г. Малинин. – СПб.: Наука, 1993. – 471 с.
18. Horstemeyer, M.F. Multiscale modeling: A review / M.F. Horstemeyer // Practical Aspects of Computational Chemistry. – Springer Science + Business Media B.V., 2009. – P. 87–135. DOI: 10.1007/978-90-481-2687-3_4
19. McDowell, D.L. A perspective on trends in multiscale plasticity / D.L. McDowell // Int. J. Plasticity. – 2010. – Vol. 26. – P. 1280–1309. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010. 02.008
20. Roters, F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework / F. Roters. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p. DOI: 10.18154/RWTH-CONV-144865
21. Трусов, П.В. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования материалов. Ч.1. Жесткопластические и упругопластические модели / П.В. Трусов, П.С. Волегов // Вестник Пермского государственного технического университета. Механика. – 2011. – № 1. – С. 5–45.
22. Трусов, П.В. Физические теории пластичности: теория и приложения к описанию неупругого деформирования

материалов. Ч.2. Вязкопластические и упруговязкопластические модели / П.В. Трусов, П.С. Волегов // Вестник Пермского государственного технического университета. Механика. – 2011. – № 2. – С. 101–131.

23. Трусов, П.В. Многоуровневые модели моно- и поликристаллических материалов: теория, алгоритмы, примеры применения / П.В. Трусов, А.И. Швейкин. – Новосибирск: Издательство СО РАН, 2019. – 605 с. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV

24. Трусделл, К. Первоначальный курс рациональной механики сплошных сред / К. Трусделл. – М.: Мир, 1975. – 592 с.

25. Grain reorientation during the plastic deformation of f.c.c. metals / B. Bacroix, J.J. Jonas, F. Montheillet, A. Skalli // Acta Metall. – 1986. – Vol. 34, is.5. – P. 937–950. DOI: 10.1016/0001-6160(86)90067-2

26. 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

27. Lin, T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face – centered cubic crystal / T.H. Lin // J. Mech. Phys. Solids. – 1957. – Vol. 5, is.1. – P. 143–149. DOI: 10.1016/0022-5096(57)90058-3

28. Hutchinson, J.W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials / J.W. Hutchinson // Proc. R. Soc. Lond. Ser. A. Math. Phys. Sci. – 1976. – Vol.348, Is.1652. – P. 101–126. DOI: 10.1098/rspa.1976.0027)

29. Peirce, D. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids / D. Peirce, R.J. Asaro, A. Needleman // Acta Metall. – 1983. – Vol. 31. – P. 1951–1976. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90014-7

30. Asaro, R.J. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals / R.J. Asaro, A. Needleman // Acta Metall. – 1985. – Vol. 33. – P. 923–953. DOI:10.1016/0001-6160(85)90188-9

31. Tokuda, M. Inelastic behaviour of polycrystalline metals under complex loading condition / M. Tokuda, J. Kratochvil, N. Ohno // Int. J. Plasticity. –1985. – Vol.1. – P. 141–150. DOI: 10.1016/0749-6419(85)90025-7

32. Mathur, K.K. On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes / K.K. Mathur, P.R. Dawson // Int. J. Plasticity. – 1989. – Vol. 5. – P. 67–94. DOI: 10.1016/0749-6419(89)90020-X

33. Kalidindi, S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models / S.R. Kalidindi // J. Mech. Phys. Solids. – 1998. – Vol.46, no. 2. – P. 267–290. DOI: 10.1016/S0022-5096(97)00051-3

34. Havner, K.S. Comparative evaluation of a viscoplastic power-law and rate-independent crystal plasticity in channel die compression / K.S. Havner // Mechanics of Materials. – 2013. – Vol. 59. – P. 126–141. DOI: 10.1016/j.mechmat.2012. 09.004

35. Neale, K.W. Use of crystal plasticity in metal forming simulations / K.W. Neale // Int. J. Mech. Sci. – 1993. – Vol.35(12). – P. 1053–1063. DOI: 10.1016/0020-7403(93)90055-Y

36. Anand, L. computational procedure for rate–independent crystal plasticity / L. Anand, M. Kothari // J. Mech. Phys. Solids. – 1996. – Vol.44, no. 4. – P. 525–558. DOI: 10.1016/0022-5096(96)00001-4

37. Steinmann, P. On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity / P. Steinmann, E. Stein // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 1996. – Vol. 129, no. 3. – P. 235–254. DOI:10.1016/0045-7825(95)00913-210.1002/abio.370040210

38. Kallend, J.S. A simulation of texture development in f.c.c. metals / J.S. Kallend, G.J. Davies // Philosophical Magazine. – 1972. – Vol. 25. – P. 471–490. DOI: 10.1080/14786437208226817

39. Van Houtte, P. Lösung für die verallgemeinerte Taylor-Theorie des plastischen Fließens / P. Van Houtte, E. Aernoudt // Int. J. Materials Research. – 1975. – Vol. 66, no. 4. – P. 202–209. DOI: 10.1515/ijmr-1975-660403

40. On the numerical integration of rate independent single crystal behavior at large strain / M.B. Bettaieb, Débordes O., Dogui A., Duchкne L., Keller C. // Int. J. Plasticity. – 2012. – Vol. 32–33. – P.184-217. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.10.010

41. 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

42. Zisman, A.A. Rate-independent selection of slip patterns on grain and subgrain scales: state of the art / A.A. Zisman, N.Yu. Ermakova // Materials Physics and Mechanics – 2022. – Vol. 49. – P. 160–172. DOI: 10.18149/MPM.4912022_12

43. Knockaert, R. Rate-independent crystalline and polycrystalline plasticity, application to FCC materials / R. Knockaert, Y. Chastel, E. Massoni // Int. J. Plasticity. – 2000. – Vol. 16. – P. 179–198. DOI:10.1016/S0749-6419(99)00071-6

44. Schröder, J. Aspects of computational rate-independent crystal plasticity / J. Schröder, C. // Miehe Computational Materials Science – 1997. – Vol. 9. – P. 168–176. DOI: 10.1016/S0927-0256(97)00072-4

45. Miehe, C. A comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity / C. Miehe, J. Schröder // Int. J. Numerical Methods in Engineering. – 2001. – Vol. 50. – P. 273–298. DOI: 10.1002/1097-0207(20010120)50:2<273::AID-NME17>3.0.CO;2-Q

46. McGinty, R.D. A semi-implicit integration scheme for rate independent finite crystal plasticity / R.D. McGinty, D.L. McDowell // Int. J. Plasticity. – 2006. – Vol. 22. – P. 996–1025. DOI: 10.1016/j.ijplas. 2005.06.002

47. Zuo, Q.H. On the uniqueness of a rate-independent plasticity model for single crystals / Q.H. Zuo // Int. J. Plasticity. – 2011. – Vol. 27. – P. 1145–1164. DOI: 10.1016/ j.ijplas.2010.12.002

48. Mánik, T. Review of the Taylor ambiguity and the relationship between rate-independent and rate-dependent full-constraints Taylor models / T. Mánik, B. Holmedal // Int. J. Plasticity. – 2014. – Vol. 55. – P. 152–181. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.10.002

49. Hill, R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals for multislip / R. Hill // J. Mech. Phys. Solids. – 1966. – Vol. 14. – P. 95–102. DOI: 10.1016/0022-5096 (66)90040-8

50. Hill, R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain / R. Hill, J.R. Rice // J. Mechanics and Physics of Solids – 1972. – Vol. 20. – P. 401–413. DOI:10.1016/0022-5096(72)90017-8

51. Havner, K.S. On unification, uniqueness and numerical analysis in plasticity / K.S. Havner // Int. J. Solids and Structures – 1977. – Vol. 13. – P. 625–635. DOI: 10.1016/0020-7683(77)90045-2

52. Franciosi, P. Crystal hardening and the issue of uniqueness / P. Franciosi, A. Zaoui // Int. J. Plasticity. – 1991. – Vol. 7. – P. 295–311. DOI: 10.1016/0749-6419(91)90037-Y

53. Renouard, M. Calculation of the extent of slips in the homogeneous plastic deformation of a single-crystal under given stresses and strains / M. Renouard, M. Wintenberger // Comptes Rendus De L Academie Des Sciences Serie Li. –1981. – Vol. 292. – P. 385–388.

54. Driver, J.H. A theoretical and experimental study of the plastic deformation of f.c.c. crystals in plane strain compression / J.H. Driver, A. Skalli, M. Wintenberger // Philosophical Magazine A. – 1984. – Vol. 49, no. 4. – P. 505–524. DOI: 10.1080/01418618408236552

55. Schmidt-Baldassari, M. Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity / M. Schmidt-Baldassari // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2003. – Vol. 192, iss.11–12. – P. 1261–1280. DOI: 10.1016/s0045-7825(02)00563-7

56. Fohrmeister, V. Rate-independent gradient-enhanced crystal plasticity theory – Robust algorithmic formulations based on incremental energy minimization / V. Fohrmeister, J. Mosler // Int. J. Solids and Structures. – 2024. – Vol. 288. – 112622 (15 p.). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2023.112622

57. Orthaber, M. On the selection of active slip systems in rate independent crystal plasticity / M. Orthaber, T. Antretter, H.-P. Gänser // Key Engineering Materials. – 2013. – Vol. 554–557. – P.1147–1156. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.554-557.1147

58. Gambin, W. Plasticity of crystals with interacting slip systems / W. Gambin // Engineering Transactions – 1991. – Vol. 39, no. 3–4. – P. 303–324.

59. Gambin, W. Refined analysis of elastic-plastic crystals // W. Gambin / Int. J. Solids Structures – 1992. – Vol. 29, is.16. – P. 2013–2021. DOI: 10.1016/0020-7683(92)90191-U

60. Gambin, W. Modeling of deformation texture development based on rate independent crystal plasticity / W. Gambin, F. Barlat // Int. J. Plasticity. – 1997. – Vol. 13. – P. 75–85. DOI: 10.1016/S0749-6419(97)00001-6

61. Holmedal, B. Regularized yield surfaces for crystal plasticity of metals / B. Holmedal // Crystals. – 2020. – Vol. 10. – P. 1076–1093. DOI: 10.3390/cryst10121076

62. Arminjon, M. A regular form of the Schmid law. Application to the ambiguity problem / M. Arminjon // Textures and Microstructures. – 1991. – Vol 14–18. – P. 1121–1128. DOI: 10.1155/TSM.14-18.1121

63. Трусов, П.В. О несимметричных мерах напряженного и деформированного состояния и законе Гука / П.В. Трусов // Вестник ПНИПУ. Механика. – 2014. – № 2. – С. 220–237.

64. Поздеев, А.А. Большие упругопластические деформации: теория, алгоритмы, приложения / А.А. Поздеев, П.В. Трусов, Ю.И. Няшин. – М.: Наука, 1986. – 232 с.

65. Трусов, П.В. О разложении движения, независимых от выбора системы отсчета производных и определяющих соотношениях при больших градиентах перемещений: взгляд с позиций многоуровневого моделирования / П.В. Трусов, А.И. Швейкин, А.Ю. Янц // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т. 19, №2. – С.47–65. DOI: 10.24411/1683-805X-2016-00052

66. Трусов, П.В. О разложении движения и определяющих соотношениях в геометрически нелинейной упруговязкопластичности кристаллитов / П.В. Трусов, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2016. – Т.19, №3. – С. 25–38. DOI: 10.24411/1683-805X-2016-00061

67. Трусов, П.В. Анализ деформирования ГЦК–металлов с использованием физической теории упругопластичности / П.В. Трусов, В.Н. Ашихмин, А.И. Швейкин // Физическая мезомеханика. – 2010. – Т. 13, №3. – С. 21–30.

68. Shveykin A.I. Some issues with statistical crystal plasticity models: description of the effects triggered in fcc crystals by loading with strain-path changes / A.I. Shveykin, K.A. Romanov, P.V. Trusov // Materials. – 2022. – Vol.15. – 6586 (21 p.). DOI: 10.3390/ma15196586

## References

1. Hill R. Matematicheskaya teoriya plastichnosti [Mathematical theory of plasticity]. – M.: Gostekhizdat, 1956. – 407 p.

2. Il'yushin A.A. Plastichnost'. Osnovy obshchey matematicheskoy teorii [Plasticity. Fundamentals of general mathematical theory]. – M.: AN SSSR, 1963. – 272 p.

3. Il'yushin A.A. Plastichnost'. Ch.1. Uprugo-plasticheskiye deformatsii [Plasticity. Part 1. Elastic-plastic deformations]. – M.: Logos, 2004. – 388 p.

4. Vasin R.A. Opredelyayushchiye sootnosheniya teorii plastichnosti [Constitutive relations of the theory of plasticity] // Itogi nauki i tekhniki. Ser. Mekhanika deformiruyemogo tverdogo tela. VINITI. – 1990. –T. 21. – P. 3–75.

5. Ishlinskiy A.Yu., Ivlev D.D. Matematicheskaya teoriya plastichnosti [Mathematical theory of plasticity]. – Moskva: Fizmatlit, 2001. – 701 p.

6. Rice J.R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal-variable theory and its application to metal plasticity // J. Mech. Phys. Solids. – 1971. – Vol.19. – P.433–455. DOI: 10.1016/0022-5096(71)90010-X

7. Kolarov D., Baltov A., Boncheva N. Mekhanika plasticheskikh sred [Mechanics of plastic media]. – M.: Mir, 1979. – 302 p.

8. Mozhen G. Mekhanika elektromagnitnykh sploshnykh sred [Mechanics of electromagnetic continuous media]. – M.: Mir, 1991. – 560 p.

9. McDowell D.L. Internal state variable theory// In: Handbook of Materials Modeling, S. Yip (ed.). – Springer, 2005. – P. 1151–1169. DOI: 10.1007/978-1-4020-3286-8_58

10. Ashikhmin V.N., Volegov P.S., Trusov P.V. Konstitutivnyye sootnosheniya s vnutrennimi peremennymi: obshchaya struktura i prilozheniye k teksturoobrazovaniyu v polikristallakh [Constitutive relations with internal variables: general structure and application to texture formation in polycrystals] // Vestnik Permskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta. Matematicheskoye modelirovaniye sistem i protsessov. – 2006. – № 14. – P. 11–26.

11. Trusov P.V. et al. Constitutive relations and their application to the description of micro-structure evolution / Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Volegov P.S., Shveykin A.I. // Physi-cal Mesomechanics. – 2010. – Vol. 13, Is.1-2. – Pp. 38–46. DOI: 10.1016/j.physme.2010.03.005

12. Horstemeyer M.F., Bammann D.J. Historical review of internal state variable theory for inelasticity // Int. J. Plasticity. – 2010. – Vol. 26. – P. 1310–1334. DOI: 10.1016/j.ijplas.2010. 06.005

13. Maugin G.A. The saga of internal variables of state in continuum thermo-mechanics (1893-2013) // Mechanics Research Communications. – 2015. – Vol.69. – P. 79–86. DOI: 10.1016/j.mechrescom.2015.06.00

14. Taylor G.I. Plastic strain in metals // J. Inst. Metals. – 1938. – Vol.62. – P. 307–324.

15. Bishop J.F., Hill R. A theory of the plastic distortion of a polycristalline aggregate under combined stresses // Phil. Mag. Ser.7. – 1951. – Vol.42, No.327. – P. 414–427. DOI: 10.1080/14786445108561065

16. Bishop J.F.W., Hill R. A theoretical derivation of the plastic properties of a polycristalline face – centered metal // Phil. Mag. Ser.7. – 1951. – Vol.42, No.334. – P. 1298–1307. DOI: 10.1080/ 14786444108561385

17. Likhachev V.A., Malinin V.G. Strukturno – analiticheskaya teoriya prochnosti [Structural-analytical theory of strength]. – SPb.: Nauka, 1993. – 471 p.

18. 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

19. 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

20. Roters F. Advanced material models for the crystal plasticity finite element method: Development of a general CPFEM framework. – RWTH Aachen: Aachen, 2011. – 226 p. DOI: 10.18154/RWTH-CONV-144865

21. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskiye teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. CH.1. Zhestkoplasticheskiye i uprugoplasticheskiye modeli [Physical theories of plasticity: theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 1. Rigid-plastic and elastoplastic models ] // Vestnik PGTU. Mekhanika. – 2011. –№.1. – P. 5–45.

22. Trusov P.V., Volegov P.S. Fizicheskiye teorii plastichnosti: teoriya i prilozheniya k opisaniyu neuprugogo deformirovaniya materialov. Ch.2. Vyazkoplasticheskiye i uprugovyazkoplasticheskiye modeli [Physical theories of plasticity: theory and applications to the description of inelastic deformation of materials. Part 2. Elastoplastic and elasticviscoplastic models] // Vestnik PGTU. Mekhanika. – 2011. – №.2. – P. 101–131.

23. Trusov P.V., Shveykin A.I. Mnogourovnevyye modeli mono- i polikristallicheskikh materialov: teoriya, algoritmy, primery primeneniya [Multilevel models of mono- and polycrystalline materials: theory, algorithms, application examples]. – Novosibirsk: Izdatel'stvo SO RAN, 2019. – 605 p. DOI: 10.15372/MULTILEVEL2019TPV

24. Truesdell C.A. A first course in rational continuum mechanics. – New York: Academic Press, 1977. – 299 p.

25. Bacroix B. et al. Grain reorientation during the plastic deformation of f.c.c. metals / Bacroix B., Jonas J.J., Montheillet F., Skalli A. // Acta Metall.– 1986. – Vol.34, Is.5. – P.937-950. DOI: 10.1016/0001-6160(86)90067-2

26. Gladkikh P.A., Trusov P.V. Vliyaniye vybora aktivnykh sistem skol'zheniya v dvukhurovnevykh uprugoplasticheskikh modelyakh tipa Teylora –Bishopa – Khilla na otklik polikristallicheskikh materialov [Influence of the choice of active slip systems in two-level elastoplastic models of the Taylor–Bishop–Hill type on the response of polycrystalline materials] // Prikladnaya matematika i voprosy upravleniya. – 2023. – № 3. – P. 22–38. DOI 10.15593/2499-9873/2023.3.02

27. Lin T.H. Analysis of elastic and plastic strains of a face – centered cubic crystal // J. Mech. Phys. Solids. – 1957. – Vol.5, Is.1. – P. 143–149. DOI: 10.1016/0022-5096(57)90058-3

28. Hutchinson J.W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials // Proc. R. Soc. Lond. Ser. A. Math. Phys. Sci. – 1976. – Vol.348, Is.1652. – P. 101–126. DOI: 10.1098/rspa.1976.0027)

29. Peirce D., Asaro, R.J., Needleman A., Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids // Acta Metall. – 1983. – Vol. 31. – P. 1951–1976. DOI: 10.1016/0001-6160(83)90014-7

30. Asaro R.J., Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals // Acta Metall. – 1985. – Vol. 33. – P. 923–953. DOI: 10.1016/0001-6160(85)90188-9

31. Tokuda M., Kratochvil J., Ohno N. Inelastic behaviour of polycrystalline metals under complex loading condition // Int. J. Plasticity. –1985. – Vol.1. – P. 141–150. DOI: 10.1016/0749-6419(85)90025-7

32. Mathur K.K., Dawson P.R. On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes // Int. J. Plasticity. – 1989. – Vol. 5. – P. 67–94. DOI: 10.1016/0749-6419(89)90020-X

33. Kalidindi S.R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models // J. Mech. Phys. Solids. – 1998. – Vol. 46, No. 2. – P. 267–290. DOI:10.1016/S0022-5096(97)00051-3

34. Havner K.S. Comparative evaluation of a viscoplastic power-law and rate-independent crystal plasticity in channel die compression // Mechanics of Materials. – 2013. – Vol.59. – P. 126–141. DOI: 10.1016/j.mechmat.2012. 09.004

35. Neale K.W. Use of crystal plasticity in metal forming simulations // Int. J. Mech. Sci. – 1993. – Vol.35, Is.12. – P. 1053–1063. DOI: 10.1016/0020-7403(93)90055-Y

36. Anand L., Kothari M. A computational procedure for rate–independent crystal plasticity // J. Mech. Phys. Solids. –1996. – Vol. 44, No. 4. – P. 525–558. DOI: 10.1016/0022-5096(96)00001-4

37. Steinmann P., Stein E. On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 1996. – Vol.129, No.3. – P. 235–254. doi:10.1016/0045-7825(95)00913-210.1002/abio.370040210

38. Kallend J.S., Davies G.J. A simulation of texture development in f.c.c. metals // Philosophical Magazine. – 1972. – Vol. 25. – P. 471–490. DOI: 10.1080/14786437208226817

39. Van Houtte P., Aernoudt E. Lösung für die verallgemeinerte Taylor-Theorie des plastischen Fließens // Int. J. Materials Research. – 1975. – Vol. 66, No. 4. – P. 202–209. DOI: 10.1515/ijmr-1975-660403

40. Bettaieb M.B. et al. On the numerical integration of rate independent single crystal behavior at large strain /, Débordes O., Dogui A., Duchкne L., Keller C. // Int. J. Plasticity. – 2012. – Vol. 32-33. – P. 184–217. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.10.010

41. Zhang L. et al. A stochastic approach to capture crystal plasticity / Zhang L., Dingreville R., Bartel T., Lusk M.T. // Int. J. Plasticity. – 2011. – Vol. 27. – P. 1432–1444. DOI: 10.1016/j.ijplas.2011.04.002

42. Zisman A.A., Ermakova N.Yu. Rate-independent selection of slip patterns on grain and subgrain scales: state of the art // Materials Physics and Mechanics – 2022. – Vol. 49. – P. 160–172. DOI: 10.18149/MPM.4912022_12

43. Knockaert R., Chastel Y., Massoni E. Rate-independent crystalline and polycrystalline plasticity, application to FCC materials // Int. J. Plasticity. – 2000. – Vol. 16. – P. 179–198. DOI: 10.1016/S0749-6419(99)00071-6

44. Schröder J., Miehe C. Aspects of computational rate-independent crystal plasticity // Computational Materials Science – 1997. – Vol. 9. – P. 168–176. DOI: 10.1016/S0927-0256(97)00072-4

45. Miehe C., Schröder J. A comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity // Int. J. Numerical Methods in Engineering. – 2001. – Vol. 50. – P. 273–298. DOI:10.1002/1097-0207(20010120)50:2<273::AID-NME17>3.0.CO;2-Q

46. 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

47. 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

48. Mánik T., Holmedal B. Review of the Taylor ambiguity and the relationship between rate-independent and rate-dependent full-constraints Taylor models // Int. J. Plasticity. – 2014. – Vol.55. – P. 152–181. DOI: 10.1016/j.ijplas.2013.10.002

49. Hill R. Generalized constitutive relations for incremental deformation of metal crystals for multislip // J. Mech. Phys. Solids. – 1966. – Vol. 14. – P. 95–102. DOI: 10.1016/0022-5096 (66)90040-8

50. Hill R., Rice J.R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain // Jour-nal of the Mechanics and Physics of Solids – 1972. – Vol. 20. – P. 401–413. DOI: 10.1016/0022-5096(72)90017-8

51. Havner K.S. On unification, uniqueness and numerical analysis in plasticity // Int J. Solids and Structures – 1977. – Vol.13. – P. 625–635. DOI: 10.1016/0020-7683(77)90045-2

52. Franciosi P., Zaoui A., Crystal hardening and the issue of uniqueness // Int. J. of Plasticity. – 1991. – Vol. 7. – P. 295–311. DOI: 10.1016/0749-6419(91)90037-Y

53. Renouard M., Wintenberger M. Calculation of the extent of slips in the homogeneous plastic deformation of a single-crystal under given stresses and strains // Comptes Rendus De L Academie Des Sciences Serie Li. –1981. – Vol. 292. – P. 385–388.

54. Driver J.H., Skalli A., Wintenberger M. A theoretical and experimental study of the plastic deformation of f.c.c. crystals in plane strain compression // Philosophical Magazine A. – 1984. – Vol.49, No.4. – P. 505–524. DOI: 10.1080/01418618408236552

55. Schmidt-Baldassari M. Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity // Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. – 2003. – Vol.192, Iss.11-12. – P. 1261–1280. DOI: 10.1016/s0045-7825(02)00563-7

56. Fohrmeister V., Mosler J. Rate-independent gradient-enhanced crystal plasticity theory – Robust algorithmic formulations based on incremental energy minimization // Int. J. Solids and Structures. – 2024. – Vol. 288. – 112622 (15 p.). DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2023.112622

57. Orthaber M., Antretter T., Gänser H.-P. On the selection of active slip systems in rate independent crystal plasticity // Key Engineering Materials. – 2013. – Vols. 554-557. – P. 1147–1156. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.554-557.1147

58. Gambin W. Plasticity of crystals with interacting slip systems // Engineering Transactions – 1991. – Vol. 39, No.3-4. – P. 303–324.

59. Gambin W. Refined analysis of elastic-plastic crystals // Int. J. Solids Structures – 1992. – Vol. 29, Is.16. – P. 2013–2021. DOI: 10.1016/0020-7683(92)90191-U

60. Gambin W., Barlat F. Modeling of deformation texture development based on rate independent crystal plasticity // Int. J. Plasticity. – 1997. – Vol. 13. – P. 75–85. DOI: 10.1016/S0749-6419(97)00001-6

61. Holmedal B. Regularized yield surfaces for crystal plasticity of metals // Crystals. – 2020. – Vol. 10. – P. 1076–1093. DOI: 10.3390/cryst10121076

62. Arminjon M. A regular form of the Schmid law. Application to the ambiguity problem // Textures and Microstructures. – 1991. – Vols 14-18. – P. 1121–1128. DOI: 10.1155/TSM.14-18.1121

63. Trusov P.V. O nesimmetrichnykh merakh napryazhennogo i deformirovannogo sostoyani-ya i zakone Guka [On asymmetric measures of stress and deformation and Hooke's law] // Vestnik PNIPU. Mekhanika. – 2014. – № 2. – P. 220–237.

64. Pozdeyev A.A., Trusov P.V., Nyashin Yu.I. Bol'shiye uprugoplasticheskiye deformatsii: teoriya, algoritmy, prilozheniya [Large elastoplastic deformations: theory, algorithms, applications]. – M.: Nauka, 1986. – 232 p.

65. Trusov P.V., Shveykin A.I., Yanz A.Yu. Motion decomposition, frame-indifferent derivatives, and constitutive relations at large displacement gradients from the viewpoint of multilevel modeling // Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, Iss. 4. – Pp. 357–376. DOI: 10.1134/S1029959917040014

66. Trusov P.V., Shveykin A.I. On motion decomposition and constitutive relations in geometrically nonlinear elastoviscoplasticity of crystallites // Physical Mesomechanics. – 2017. – Vol. 20, Is. 4. – P. 377–391. DOI:10.1134/ S1029959917040026

67. Trusov P.V., Ashikhmin V.N., Shveykin A.I. Physical elastoplastic analysis of deformation of fcc metals // Physical Mesomechanics. – 2011. – Vol. 14, Iss.1-2. – P. 40–48. DOI: 10.1016/j.physme.2011.04.006

68. 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. – 6586 (21 p.). DOI: 10.3390/ma15196586

**Финансирование.** Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках реализации национального проекта «Наука и университеты» (в рамках выполнения государственного задания в лаборатории многоуровневого моделирования конструкционных и функциональных материалов, проект № FSNM-2024-0002).

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Вклад авторов равноценен.**

**Financing.** The study was carried out with a financial support from the Ministry of Education and Science of the Russian Federation as part of the implementation of the national project “Science and Universities” (the state assignment fulfillment in the laboratory of multilevel structural and functional materials modeling, Project no. FSNM-2024-0002).

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

**The contribution of the authors is equivalent.**