



STUDY OF FCC SINGLE CRYSTALS ELASTIC-PLASTIC CONSTITUTIVE RELATION

Guilherme Fiorin Fornel

Eduardo Bittencourt

guilherme.fornel@ufrgs.br

eduardo.bittencourt@ufrgs.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Departamento de Engenharia Civil

Av. Osvaldo Aranha, 99, 90035-190, Porto Alegre, RS, Brazil

Rafael Luis Moresco

rafael_moresco01@yahoo.com.br

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Abstract. *This work deals with two-dimensional elastic-plastic analysis of FCC (face-centered cubic) metallic single crystals in the context of small strains. The single crystal plastic behavior is a primal aspect in material behavior understanding at micro and submicroscopic scale. The study of such scales is important due to the expansion of nanotechnologies. Rate-independent behavior and the Hutchinson-Asaro's hardening are considered in this work. Three different functions for the hardening modulus are taken into account. In two of them, the effect of rapid decrease in hardening modulus observed in some alloy crystals is also regarded. The active slip system determination is based on Schmid criteria. This work presents a conditioning study of the constitutive equation system. It is demonstrated that the orientation of crystal lattice does not change the equation system conditioning. Uniform stress field examples are analyzed. The boundary conditions are parallel loading to $(1\bar{1}0)$ crystalline plane and strains are blocked in $[1\bar{1}0]$ direction, characterizing plane-strain. In these circumstances it is possible to adopt the simplified condition in which up to three slip systems are active: $(001)[110]$, $(\bar{1}\bar{1}1)[112]$ and $(\bar{1}\bar{1}1)[\bar{1}\bar{1}2]$. It is shown that the numerical stability depends significantly on properties associated to the strain hardening.*

Keywords: *Crystal plasticity, Crystal hardening, Numerical stability*

1 INTRODUÇÃO

Apesar da teoria clássica da plasticidade ser eficaz na descrição do comportamento mecânico macroscópico de sólidos cristalinos, não descreve o que transcorre na microestrutura do material. Fenômenos característicos desta escala são interpretados de forma especulativa através da teoria da plasticidade macroscópica. Isto dificulta o entendimento das peculiaridades micro e nanoestruturais em problemas fortemente dependentes da estrutura cristalina, como efeitos de escala no endurecimento, ductilidade e fratura. Além disso, o avanço das nanotecnologias e da produção de novos materiais necessita uma abordagem baseada no comportamento no âmbito microscópico.

Ao longo das últimas décadas monocristais metálicos sob deformação plástica têm sido tratados analítica e numericamente. Através da teoria de plasticidade monocristalina de Asaro & Rice (1977), Peirce et al (1982) analisaram numericamente deformações não uniformes e localizadas em monocristais dúcteis. Steinmann & Stein (1996) contribuíram para a análise numérica nos mesmos conceitos. Bittencourt et al (2003) realizaram análises numéricas utilizando a teoria de plasticidade cristalina não-local de Gurtin (2002). Em mecânica da fratura, Rice (1987,1988) e Drugan (2001) trataram do campo de tensões na ponta de trincas em monocristais através de análise assintótica; Cleveringa et al (2000) e Van der Giessen et al (2001) trataram o problema numericamente utilizando teoria de discordâncias discretas e Columbus & Grujicic (2002) compararam resultados de discordâncias discretas com teoria de plasticidade cristalina não local. Recentemente, Niordson & Kysar (2014) e Juul et al (2013) utilizaram o modelo de cristal Rice (1987) em análises numéricas.

Este trabalho visa a estudo numérico de uma relação constitutiva monocristalina independente do tempo segundo a teoria de plasticidade cristalina de Asaro & Rice (1977) em pequenas deformações para o modelo de cristal equivalente de Rice (1987). Sabe-se que a forma com que o endurecimento sob deformação plástica do monocristal é abordado nessa teoria pode levar a problemas de instabilidade numérica (Khan & Huang, 1995). Características numéricas da teoria são de fundamental importância na aplicação em simulações computacionais da mecânica de sólidos cristalinos com abordagens multiescala.

1.1 Comportamento plástico de monocristais

As primeiras constatações da dependência do comportamento plástico de metais e a microestrutura cristalina datam do final do séc. XIX e início do século XX, de experiências com monocristais de cobre e alumínio (veja Ewing & Rosenhain(1899)). Àquela época, notou-se que a deformação plástica era acompanhada pelo surgimento de estrias na superfície do monocristal que posteriormente (Taylor & Elam (1923,1926)) mostrou-se estar relacionado com deslizamento em planos cristalográficos bem definidos. A inconsistência entre a resistência à clivagem teórica e a resistência medida em ensaios levou ao postulado que a deformação plástica está associada à existência de discordâncias, imperfeições que se propagam através da rede cristalina quando o metal é solicitado.

Essas observações motivaram o desenvolvimento de modelos considerando aspectos intrínsecos da micro e nanoestruturas, a fim de simular o comportamento mecânico de monocristais e a relação com o comportamento de policristais. Desenvolveram-se teorias baseadas na natureza discreta das discordâncias (veja Hirth & Lothe (1982)) e teorias baseadas em escalas superiores (como a abordada neste trabalho), onde considera-se distribuições uniformes de discordâncias.

1.2 Rede cristalina cúbica de face centrada

Neste estudo considera-se o comportamento de sólidos metálicos que cristalizam em uma estrutura cúbica de face centrada (CFC). Exemplo de metais que cristalizam neste tipo de rede são alumínio, cobre, ouro prata e níquel. Neste tipo de estrutura há um átomo em cada vértice da célula cúbica e um átomo na posição intermediária de cada face da célula, como apresentado na Fig. 1.

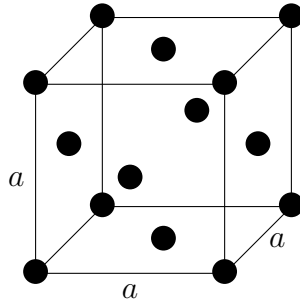


Figura 1: Estrutura cristalina *Cúbica de Face Centrada* (CFC) de aresta a .

Sabe-se que devido a simetria esta estrutura possui 12 sistemas de deslizamento cristalinos independentes (de um total de 24), formados pela combinação da família de planos $\{111\}$ (4 planos independentes) com a família de direções $\langle 111 \rangle$ (3 direções independentes).

2 PLASTICIDADE CRISTALINA EM MEIOS CONTÍNUOS

A teoria de plasticidade cristalina macroscópica tratada aqui considera dependência de propriedades microestruturais de monocristais metálicos. Os campos de tensões e deformações são considerados localmente dependentes. As relações constitutivas são consideradas independentes da taxa de carregamento. A deformação plástica é tratada como proveniente do deslizamento de porções do cristal em relação a planos cristalográficos bem definidos.

2.1 Cinemática da deformação em monocristais

O comportamento mecânico macroscópico de materiais é classicamente descrito através da mecânica dos meios contínuos. A relação entre duas configurações materiais de um corpo é descrita por relações de transformações vetoriais como função da posição das partículas materiais. Um vetor infinitesimal $d\mathbf{X}$ na configuração de referência Ω é relacionado com o vetor infinitesimal $d\mathbf{x}$ na configuração atual Ω' através da transformação

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{X} \quad (1)$$

onde $\mathbf{F}$ é o gradiente de deformação. De forma semelhante, a anisotropia macroscópica característica da deformação de monocristais metálicos pode ser tratada através da mecânica do contínuo através de uma abordagem multiescala, que considera aspectos microscópicos do material. Considerando que a deformação plástica em monocristais é relacionada aos movimentos de discordâncias em seu interior, Asaro e Rice (1977) propuseram a decomposição da deformação na rede cristalina em uma parcela plástica devido ao movimento de discordâncias e uma parcela elástica devido à distorções na estrutura do cristal (Fig. 2). Assim, o gradiente de deformações é decomposto segundo a relação $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p$; $\mathbf{F}^e$ é a parcela elástica e $\mathbf{F}^p$ é a parcela plástica do gradiente.

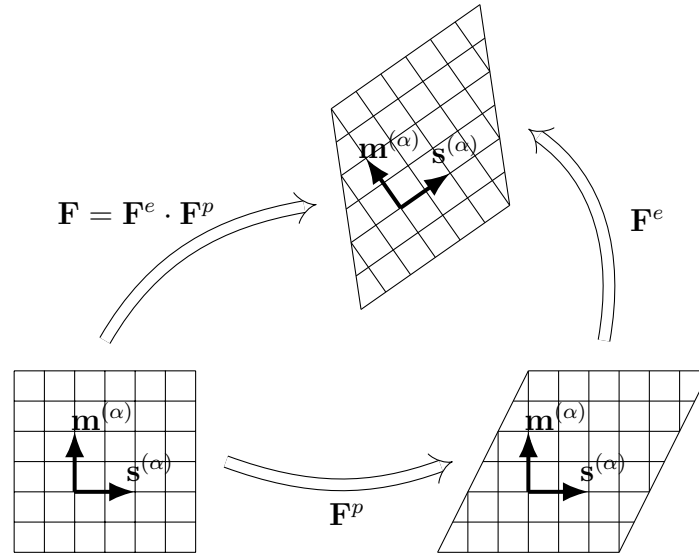


Figura 2: Decomposição do gradiente de deformações (Asaro & Rice, 1977).

Nas situações em que a distorção da rede cristalina pode ser negligenciada, assume-se a parte elástica da transformação equivalente à transformação identidade. Neste contexto somente o gradiente de deformação plástica contribui para a deformação do monocristal, logo $\mathbf{F} = \mathbf{F}^p$. Tal situação equivale à abordagem em *pequenas deformações*. Na situação de pequenas deformações utiliza-se a decomposição aditiva da deformação total, ϵ_{ij} , em uma parte elástica, ϵ_{ij}^e , e uma parte plástica, ϵ_{ij}^p ,

$$\epsilon_{ij} = \epsilon_{ij}^e + \epsilon_{ij}^p \quad (2)$$

A fluxo de deformação plástica é relacionado com os deslizamentos nos sistemas cristalográficos α por

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \sum_{(\alpha)} P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \quad P_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(m_i^{(\alpha)} s_j^{(\alpha)} + m_j^{(\alpha)} s_i^{(\alpha)} \right) \quad (3)$$

onde $\gamma^{(\alpha)}$ representa o deslizamento plástico no sistema α e $P_{ij}^{(\alpha)}$ o tensor de orientação de Schmid para o sistema α . Na Eq. (3) $m_i^{(\alpha)}$ e $s_j^{(\alpha)}$ representam respectivamente os cossenos diretores do vetor normal ao plano e do vetor direção de deslizamento do sistema α .

2.2 Relação constitutiva cristalina

O tensor de orientação de Schmid possibilita calcular a tensão $\tau^{(\alpha)}$ *resolvida* no sistema cristalino α através da relação (em notação indicial)

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma_{ij} P_{ij}^{(\alpha)} \quad (4)$$

σ_{ij} é o tensor de tensões macroscópicas. Considera-se neste trabalho que o material obedece ao critério de Schmid. Segundo este critério o fluxo plástico inicia quando a tensão resolvida

supera a tensão crítica τ_{cr} , que é uma propriedade do material. Admite-se que o endurecimento cristalino dependa dos deslizamentos através do tensor de endurecimento $h_{\alpha\beta}$ conforme

$$\dot{\tau}_{cr}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (5)$$

O campo de tensões e o campo de deformações são relacionados elasticamente pela equação

$$\dot{\sigma}_{ij} = C_{ijkl} (\dot{\epsilon}_{kl} - \dot{\epsilon}_{kl}^p) \quad (6)$$

onde C_{ijkl} é o tensor de Hooke. Relacionando as Eqs. (3) e (6) e *resolvendo* no plano cristalino a expressão fica

$$P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl} - P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \quad (7)$$

A solução do problema plástico descrito pela Eq. (7) pode ser realizada em duas etapas; um preditor elástico, onde as tensões macroscópicas σ_{ij}^E (do preditor elástico) são calculadas por $\dot{\sigma}_{ij}^E = C_{ijkl} \dot{\epsilon}_{kl}$; e um retorno plástico, que corrige as tensões, satisfazendo a relação $\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{\tau}_{cr}^{(\alpha)}$. Esta abordagem é chamada de *preditor-corretor*. Assim,

$$P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\sigma}_{ij}^E - P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)} = h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (8)$$

é satisfeita pelo *preditor-corretor*. Representando a tensão do preditor elástico resolvida nos sistemas cristalográficos por $\tau^{(\alpha),E} = P_{ij}^{(\alpha)} \dot{\sigma}_{ij}^E$, a Eq. (8) toma a forma

$$\dot{\tau}^{(\alpha),E} - \left(P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} + h_{\alpha\beta} \right) \dot{\gamma}^{(\beta)} = 0 \quad (9)$$

ou ainda

$$\dot{\tau}^{(\alpha),E} - N_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} = 0 \quad (10)$$

O tensor $N_{\alpha\beta} = P_{ij}^{(\alpha)} C_{ijkl} P_{kl}^{(\beta)} + h_{\alpha\beta}$ é o tensor constitutivo cristalino, e relaciona tensões e deformações a nível microestrutura do cristal.

Neste trabalho, assume-se que o comportamento do material é independente da taxa de deformação. A Eq. (5) para um material deste tipo assume a forma

$$d\tau_{cr}^{(\alpha)} = \sum_{(\beta)} h_{\alpha\beta} d\gamma^{(\beta)} \quad (11)$$

A independência temporal de $h_{\alpha\beta}$ implica na independência temporal de $N_{\alpha\beta}$ e na equação constitutiva microestrutural

$$d\tau^{(\alpha),E} - N_{\alpha\beta} d\gamma^{(\beta)} = 0 \quad (12)$$

ou, em notação matricial,

$$[\Delta\gamma] = [N]^{-1} \cdot [\Delta\tau] \quad (13)$$

2.3 Relações de endurecimento cristalino

Khan & Huang (1995) observam que segundo medições experimentais um sistema de deslizamento não é endurecido somente pelo próprio deslizamento, chamado de auto-endurecimento, mas também pelo deslizamento nos outros sistemas, o endurecimento latente. Também observam que geralmente o endurecimento latente é maior que o auto-endurecimento. A seguir são descritos modelos de endurecimento em monocristais utilizados na literatura.

Endurecimento de Taylor. Taylor (1934) propôs um modelo de endurecimento isotrópico para monocristais no qual todos os sistemas endurecem igualmente a um valor constante $h_{\alpha\beta} = H_0$. Obviamente este modelo não pode descrever o alto endurecimento latente característico de alguns cristais. Porém, por ser mais simples, é passível de ser usado em primeira aproximação.

Endurecimento de Hutchinson-Asaro. Hutchinson (1970) e Asaro (1979) sugeriram uma regra de endurecimento da forma

$$h_{\alpha\beta} = q H(\gamma) + (1 - q) H(\gamma) \delta_{\alpha\beta} \quad (14)$$

onde $H(\gamma)$ é a função de auto-endurecimento $\delta_{\alpha\beta}$ o delta de Kronecker e q é o fator de endurecimento latente, um parâmetro do material. O deslizamento γ em situações de múltiplos sistemas ativos é tomado como a soma dos deslizamentos nos sistemas α

$$\gamma = \sum_{(\alpha)} \gamma^{(\alpha)} \quad (15)$$

Peirce et al (1982) utilizam duas dependências de H em relação γ , a de endurecimento hiperbólico e a de endurecimento de potência. A função de endurecimento hiperbólico é

$$H(\gamma) = H_0 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{H_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \quad (16)$$

onde H_0 é o endurecimento inicial, τ_0 é a tensão crítica inicial e τ_s representa o valor de saturação da tensão. Como esta função tende rapidamente à zero, é apropriada para materiais pouco endurecíveis, como ligas cristalinas pouco dúcteis. A função de endurecimento de potência é

$$H(\gamma) = H_0 \left(\frac{H_0 \gamma}{n \tau_0} + 1 \right)^{n-1} \quad (17)$$

onde n é o expoente de endurecimento. Esse tipo de endurecimento é adequado para cristais puros. A variação das funções de endurecimento com γ é apresentada na Fig. 3.

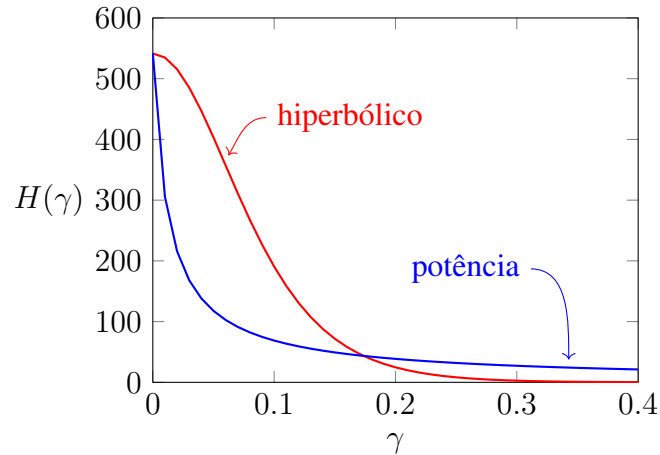


Figura 3: Variação de $H(\gamma)$ com γ para endurecimentos hiperbólico e de potência

A faixa de valores observada para o parâmetro q geralmente varia entre 1,0 e 1,4 (Peirce et al (1982)). Observa-se um fator de endurecimento latente ser superior à unidade faz com que o módulo dos valores dos elementos não-diagonais do tensor $h_{\alpha\beta}$ superem os diagonais; como consequência a matriz constitutiva cristalina $\mathbf{N}$ tem os termos não diagonais da ordem dos diagonais. Isto pode levar ao mal condicionamento ou singularidade do sistema da Eq. 13, já que não é garantida a diagonal-dominância da matriz constitutiva.

3 CRISTAL EQUIVALENTE DE RICE

Em um trabalho pioneiro, Rice (1987) obteve soluções para o campo de tensões próximo na ponta de trincas em monocristais CFC elasto-plásticos perfeitos em estado plano de deformações com escoamento baseado no critério de Schmid, utilizando análise assintótica. O cristal equivalente de Rice é válido para situações onde as deformações elásticas são muito inferiores às plásticas, podendo ser desprezadas.

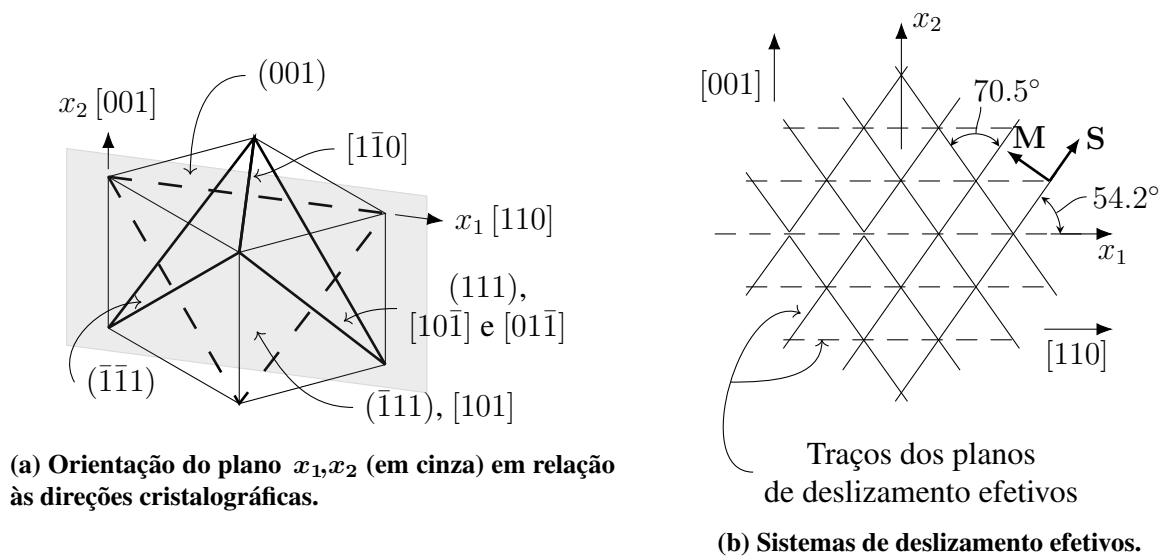


Figura 4: Cristal equivalente de Rice (1987)

Neste modelo é assumido carregamento no plano $(\bar{1}10)$ e deformações totais restringidas na direção $[1\bar{1}0]$ ($\epsilon_{33} = 0$), caracterizando estado plano de deformações. Como as deformações elásticas são desprezadas, a componente do tensor de deformações plásticas $\epsilon_{33}^p = \epsilon_{33} - \epsilon_{33}^e$ também deve ser restringida. Este raciocínio leva à conclusão de que deslizamentos na direção de x_3 não concordam com grandes deformações plásticas e portanto não devem contribuir para o comportamento do cristal no estado de tensões considerado. Logo, apenas deslizamentos nos planos (111) e $(\bar{1}\bar{1}1)$, delimitados com linha contínua na Fig. 4a, e $(1\bar{1}1)$ e $(\bar{1}11)$, com linha tracejada na Fig. 4b, são possíveis no cristal CFC equivalente de Rice.

Para atender a compatibilidade cinemática aliada à simetria das células cristalinas é assumido que o cisalhamento no planos cristalinos envolve quantidades idênticas e simultâneas de deslizamento em cada direção cristalina, de forma que componentes na direção de x_3 dos deslizamentos possam se anular. Dessa forma introduz-se o conceito de sistemas de deslizamento efetivos.

Assim, deslizamentos nos planos (111) e $(\bar{1}\bar{1}1)$ ocorrem simultaneamente nas direções $[10\bar{1}]$ e $[01\bar{1}]$, de forma que a direção efetiva de deslizamento é $[11\bar{2}]$. Sistemas que contém os planos $(\bar{1}11)$ e $(1\bar{1}1)$ correspondem ao sistema efetivo cujo plano é (001) e direção $[110]$. Deformações plásticas não correspondentes com os sistemas de deslizamento efetivos são desconsideradas.

3.1 Parâmetros dos sistemas efetivos

A utilização do modelo equivalente exige a correção da tensão crítica nos sistemas de deslizamento efetivos. Rice (1973) introduziu o parâmetro β que relaciona a tensão crítica dos sistemas efetivos com a tensão crítica dos sistemas cristalográficos.

Seja o sistema efetivo α relacionado com dois sistemas cristalinos αa e αb , ambos com tensão crítica τ_{cr} . A condição de escoamento para os sistemas cristalinos é

$$m_{\mu}^{(\alpha a)} \sigma_{\mu\nu} s_{\nu}^{(\alpha a)} = \pm \tau_{cr}$$

com μ, ν tomando os valores 1 e 2. Então, é possível escrever a condição de escoamento para o sistema efetivo correspondente como

$$M_{\mu}^{(\alpha)} \sigma_{\mu\nu} S_{\nu}^{(\alpha)} = \pm \tau^{(\alpha)} = \pm \beta^{(\alpha)} \tau_{cr} \quad (18)$$

na qual β é uma constante de correção esperada existir. É fácil perceber que

$$\beta^{(\alpha)} = \frac{2 M_{\mu}^{(\alpha)} S_{\nu}^{(\alpha)}}{m_{\mu}^{(\alpha a)} s_{\nu}^{(\alpha a)} + m_{\mu}^{(\alpha b)} s_{\nu}^{(\alpha b)}} \quad (19)$$

para qualquer μ, ν . Na Tab. 1 são apresentados os vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos e efetivos relevantes para um cristal CFC.

Sistema (1):

$$\mathbf{m}^{(1a)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}\right) \quad \mathbf{s}^{(1a)} = (1, 0, 0)$$

$$\mathbf{m}^{(1b)} = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{-2}{\sqrt{6}}\right) \quad \mathbf{s}^{(1b)} = (1, 0, 0)$$

$$\mathbf{M}^{(1)} = (0, 1, 0) \quad \mathbf{S}^{(1)} = (1, 0, 0)$$

Sistema (3):

$$\mathbf{m}^{(3a)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \mathbf{s}^{(3a)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

$$\mathbf{m}^{(3b)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \mathbf{s}^{(3b)} = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{-1}{2}\right)$$

$$\mathbf{M}^{(3)} = \left(\frac{-2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, 0\right) \quad \mathbf{S}^{(3)} = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{2}{\sqrt{6}}, 0\right)$$

Tabela 1: Vetores diretores dos sistemas de deslizamento cristalográficos e efetivos (1) e (3) para o cristal CFC.

Se aplicados os valores da Tab. 1 na equação 19 (e observando a simetria dos sistemas (1) e (2)), implica que $\beta^{(1)} = \sqrt{3}$ e $\beta^{(2)} = \beta^{(3)} = \frac{2}{\sqrt{3}}$ para os sistemas efetivos.

4 INFLUÊNCIA DA ORIENTAÇÃO DOS SISTEMAS EFETIVOS NO CRISTAL DE RICE

Os sistemas de deslizamento efetivos para o cristal de Rice são numerados de acordo com a Fig. 5.

Introduz-se os vetores de direção do planos efetivos e das direções efetivas para um sistema β , respectivamente $\mathbf{M}^{(\beta)}$ e $\mathbf{S}^{(\beta)}$, como

$$\mathbf{M}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\beta + \pi/2) \\ \sin(\theta_\beta + \pi/2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{S}^{(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_\beta) \\ \sin(\theta_\beta) \end{pmatrix}$$

θ_β é o ângulo do sistema efetivo em relação ao sentido positivo do eixo x_1 . O tensor de Schmid para cristal efetivo fica

$$P_{\nu\mu}^{(\beta)} = \frac{1}{2} (M_\nu^{(\beta)} S_\mu^{(\beta)} + M_\mu^{(\beta)} S_\nu^{(\beta)})$$

com ν e μ variando de 1 a 2.

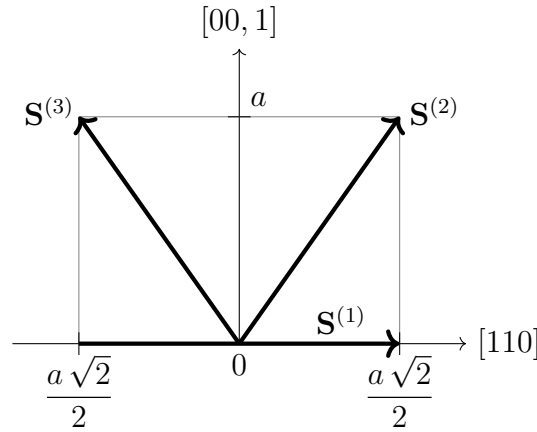


Figura 5: Numeração dos sistemas de deslizamento efetivos do cristal equivalente de Rice.

As componentes de $P_{\nu\mu}^{(\beta)}$ são

$$P_{11}^{(\beta)} = \cos(\theta_\beta + \pi/2) \cos(\theta_\beta) = -\sin(\theta_\beta) \cos(\theta_\beta)$$

$$P_{22}^{(\beta)} = \sin(\theta_\beta + \pi/2) \sin(\theta_\beta) = \sin(\theta_\beta) \cos(\theta_\beta)$$

$$P_{12}^{(\beta)} = \cos(\theta_\beta + \pi/2) \sin(\theta_\beta) + \sin(\theta_\beta + \pi/2) \cos(\theta_\beta) = \cos^2(\theta_\beta) - \frac{1}{2}$$

Logo, têm-se as seguintes relações

$$P_{11}^{(\beta)} P_{11}^{(\beta)} = P_{22}^{(\beta)} P_{22}^{(\beta)} = -P_{11}^{(\beta)} P_{22}^{(\beta)} = \sin(\theta_\alpha) \sin(\theta_\beta) \cos(\theta_\alpha) \cos(\theta_\beta)$$

$$P_{12}^{(\beta)} P_{12}^{(\beta)} = \cos^2(\theta_\alpha) \cos^2(\theta_\beta) - \frac{1}{2} (\cos^2(\theta_\alpha) + \cos^2(\theta_\beta)) + \frac{1}{4}$$

$$P_{11}^{(\beta)} P_{11}^{(\beta)} + P_{12}^{(\beta)} P_{12}^{(\beta)} = \frac{1}{4} \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta)$$

4.1 Relação constitutiva para o conjunto de sistemas efetivos

O tensor de Hooke para um material isotrópico é

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \quad (20)$$

e $\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ e $\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} = G$ são os parâmetros de Lamé; E é o módulo de elasticidade transversal, ν a razão de Poisson e G o módulo de cisalhamento.

Para o caso do cristal efetivo de Rice, a contração $P_{\nu\mu}^{(\alpha)} C_{\nu\mu\eta\theta} P_{\eta\theta}^{(\beta)}$ (índices gregos variando

de 1 a 2) fica

$$\begin{aligned}
 P_{\nu\mu}^{(\alpha)} C_{\nu\mu\eta\theta} P_{\eta\theta}^{(\beta)} &= P_{11}^{(\alpha)} C_{1111} P_{11}^{(\beta)} + P_{22}^{(\alpha)} C_{2222} P_{22}^{(\beta)} \\
 &+ 2 P_{11}^{(\alpha)} C_{1122} P_{22}^{(\beta)} + 4 P_{12}^{(\alpha)} C_{1212} P_{12}^{(\beta)} \\
 &= (\lambda + 2\mu) \left(P_{11}^{(\alpha)} P_{11}^{(\beta)} + P_{22}^{(\alpha)} P_{22}^{(\beta)} \right) \\
 &+ 2\lambda P_{11}^{(\alpha)} P_{22}^{(\beta)} + 4\mu P_{12}^{(\alpha)} P_{12}^{(\beta)} \\
 &= 4\mu \left(P_{11}^{(\alpha)} P_{11}^{(\beta)} + P_{12}^{(\alpha)} P_{12}^{(\beta)} \right) \\
 &= \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta)
 \end{aligned}$$

Então, a relação constitutiva para o cristal efetivo de Rice é

$$N_{\alpha\beta} = \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta) + h_{\alpha\beta} \quad (21)$$

e, particularizando para endurecimento de Hutchinson-Asaro:

$$N_{\alpha\beta} = \mu \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta) + q H(\gamma) + (1 - q) H(\gamma) \delta_{\alpha\beta} \quad (22)$$

É fácil notar que uma rotação do conjunto de sistemas de deslizamento não altera os valores das componentes do tensor constitutivo. Dado uma rotação φ no conjunto, para qualquer dupla de sistemas $\{\alpha, \beta\}$

$$\cos(2(\theta_\alpha + \varphi) - 2(\theta_\beta + \varphi)) = \cos(2\theta_\alpha - 2\theta_\beta)$$

o que prova a afirmação anterior.

5 CONDICIONAMENTO DA RELAÇÃO CONSTITUTIVA

A independência da relação constitutiva com o ângulo de orientação dos sistemas efetivos de Rice implica na independência do condicionamento do sistema de Eq. 13 com a orientação. Porém o endurecimento latente presente na relação constitutiva e a variação do endurecimento com a deformação pode implicar na predominância dos termos não diagonais da matriz associada, o que pode piorar o condicionamento do sistema de equações. É salientado que para o endurecimento de Taylor a equação constitutiva é sempre solúvel e bem condicionada para parâmetros do material fisicamente coerentes.

A dependência do determinante e número de condicionamento do sistema da Eq. 13 com a variação de q e de γ para as diferentes relações de endurecimento é apresentada nas Fig. 6 e 7. Os parâmetros utilizados são descritos na Tab. 2. Os parâmetros do material adotados na literatura em geral são relacionados com τ_0 . A mesma prática foi adotada neste trabalho, com as relações e o valor de $\tau_0 = 60.84$ MPa adotados por Peirce et al (1982). Tensões críticas nesta faixa normalmente são as utilizadas em análises numéricas (ver Columbus & Grujicic (2002)).

τ_0		60.84 MPa
E	$1000 \tau_0$	60840 MPa
ν		0.3
H_0	$8.9 \tau_0$	541.476 MPa
τ_s	$1.8 \tau_0$	109.512 MPa
n		0.1

Tabela 2: Parâmetros do material.

Os resultados apresentados nos gráficos das Fig. 6 e 7 mostram que na faixa de valores considerados a influência de q no determinante e condicionamento do sistemas para qualquer condição de operação dos sistemas efetivos é insignificante. Também, para qualquer caso o sistema de equações é solúvel pois o determinante da matriz constitutiva é estritamente positivo.

Em relação ao condicionamento, vê-se que para grandes deslizamentos o endurecimento hiperbólico leva a números de condicionamento bem maiores que o endurecimento em potência. Esta diferença se deve ao decrescimento assintótico a zero da relação hiperbólica, o que não ocorre na relação de potência. O número de condicionamento mais alto para a relação hiperbólica é da ordem de 10^5 . Isto significa que para uma aritmética de ponto flutuante de n casas decimais a precisão é da ordem de $n - 5$ casas decimais. Deve-se ter em mente esta possível imprecisão nos resultados em simulações utilizando este modelo.

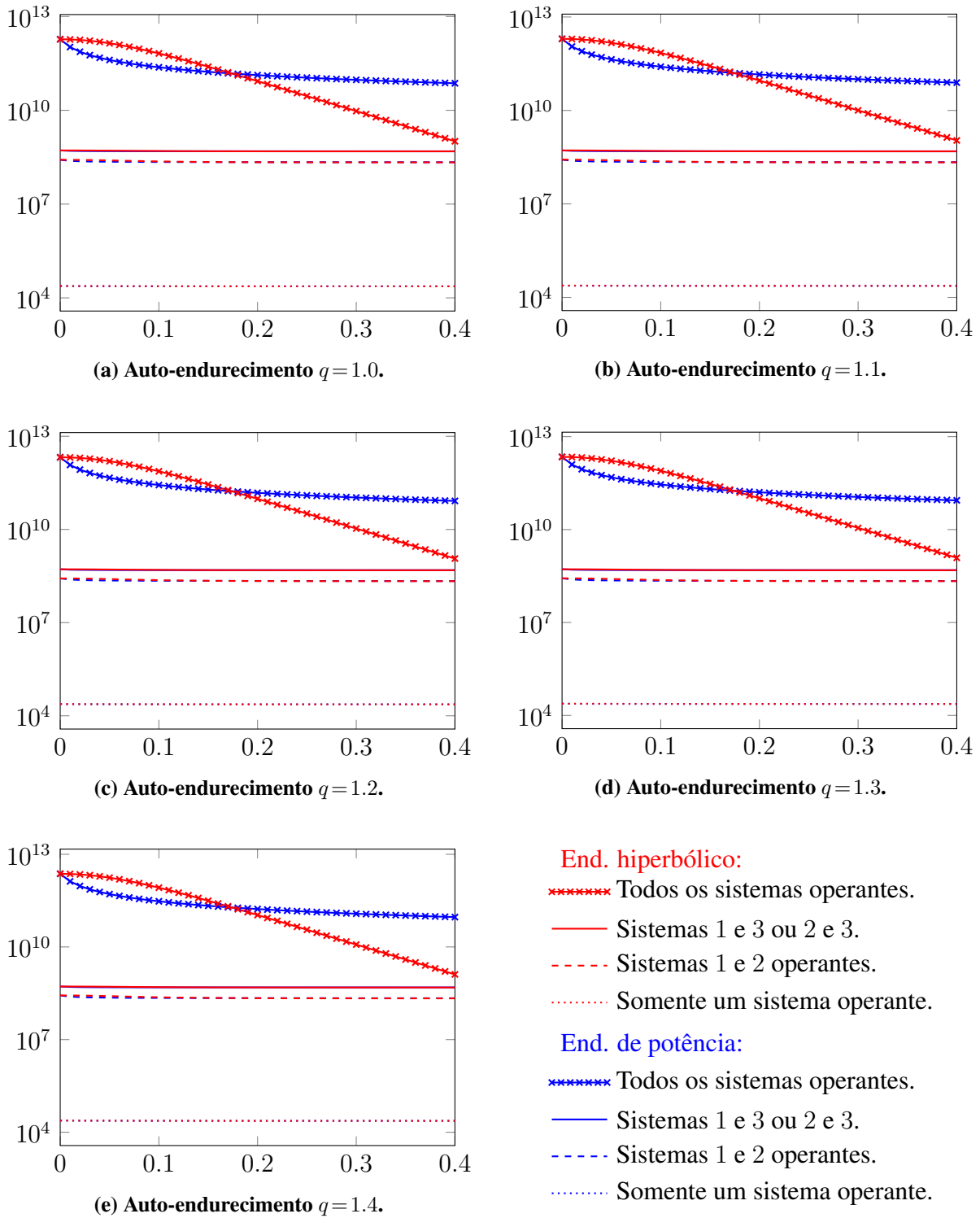


Figura 6: Variação do determinante da matriz constitutiva para diferentes coeficientes de auto-endurecimento e variações hiperbólica e de potência. O determinante é avaliado para todas as combinações de sistemas operantes.

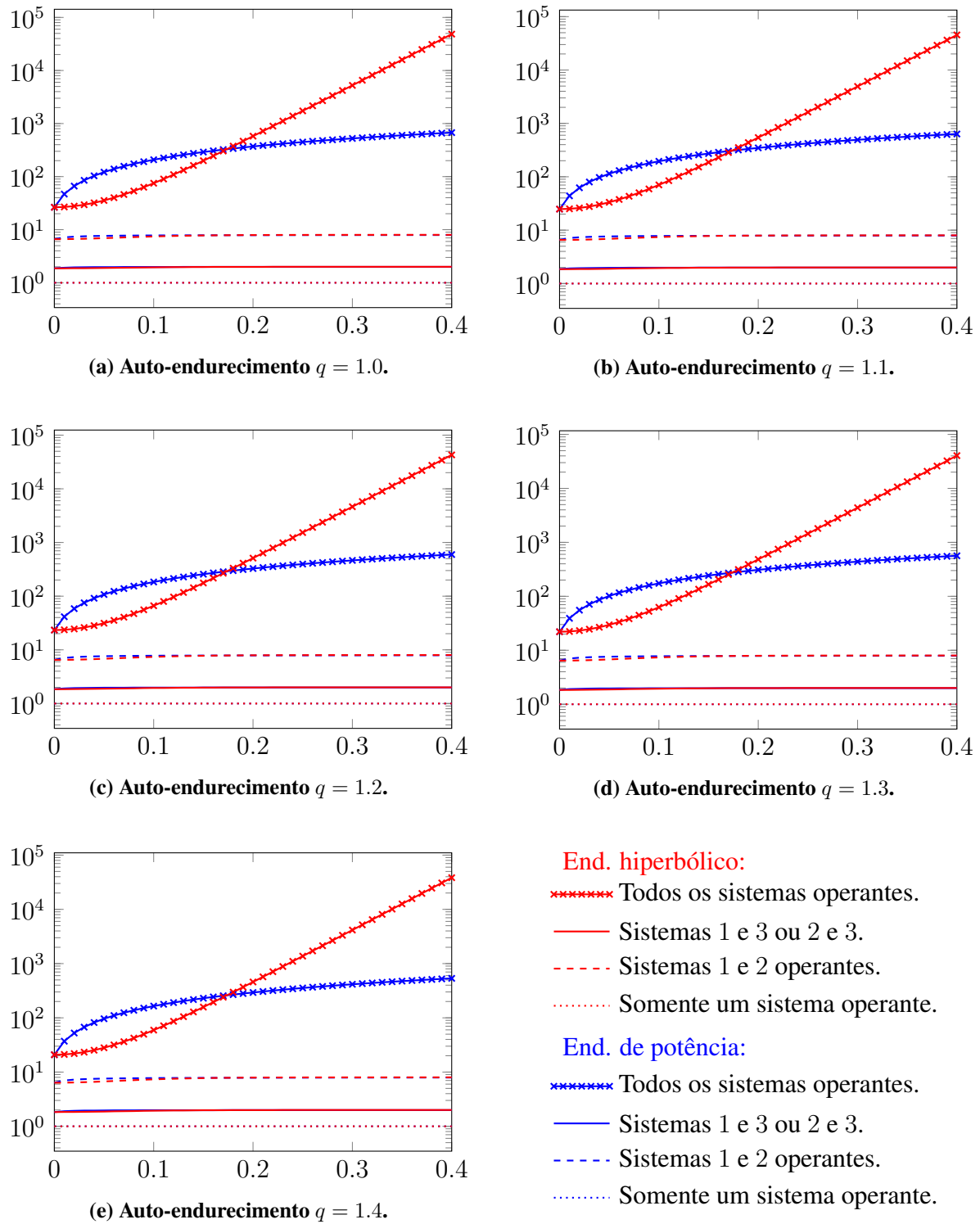


Figura 7: Variação do número de condicionamento da matriz constitutiva para diferentes coeficientes de auto-endurecimento e variações hiperbólica e de potência. O condicionamento é avaliado para todas as combinações de sistemas operantes.

6 APLICAÇÕES A ESTADOS UNIFORMES DE TENSÃO E DEFORMAÇÃO

Como exemplo são resolvidos problemas de campos uniformes (problemas estaticamente determinados). Além da aplicação da teoria, este tipo de modelo é importante para a validação de algoritmos de simulação.

Os parâmetros dos materiais utilizados nestes problemas são os mesmos da Tab. 2. São considerados pontos longe do contorno onde, o estado de tensões é uniforme segundo o princípio de Saint-Venant. Os resultados são informados na Tab. 3.

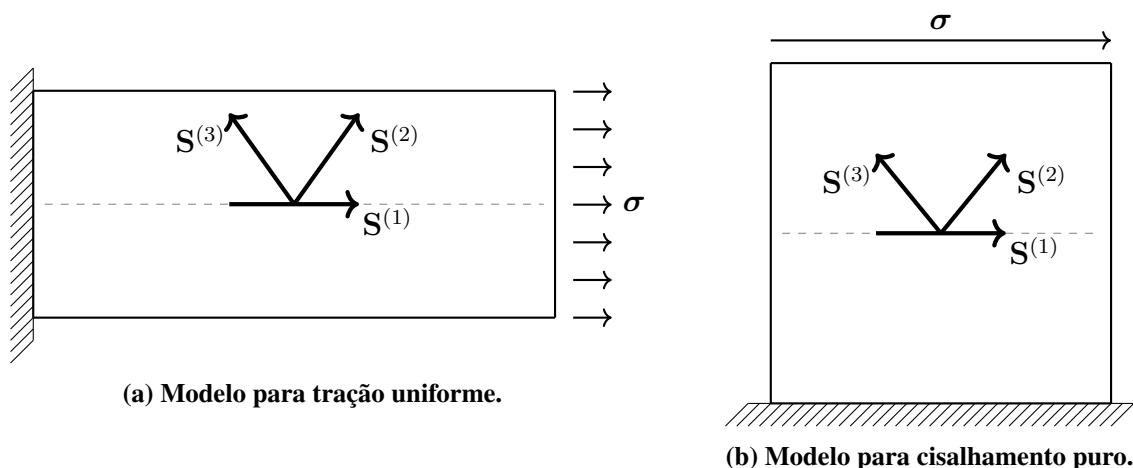


Figura 8: Exemplos - problemas estaticamente determinados.

	Tração uniforme	Cisalhamento puro
Tensão aplicada	$\sigma_{11} = 160$	$\sigma_{12} = 130$
Número de iterações	916	2688
Deformação total	$\epsilon_{11} = 0.21701417 \cdot 10^{-1}$	$\epsilon_{12} = 0.15909658$
Deformação elástica	$\epsilon_{11}^e = 0.23907486 \cdot 10^{-2}$	$\epsilon_{12}^e = 0.55500063 \cdot 10^{-2}$
Deformação plástica	$\epsilon_{11}^p = 0.19310669 \cdot 10^{-1}$	$\epsilon_{12}^p = 0.15354657$
$\tau_{cr}^{(1)}$	$0.10537797 \cdot 10^3$	$0.12974029 \cdot 10^3$
$\tau_{cr}^{(2)}$	$0.75318217 \cdot 10^2$	$0.70251981 \cdot 10^2$
$\tau_{cr}^{(3)}$	$0.75318217 \cdot 10^2$	$0.70251981 \cdot 10^2$

Tabela 3: Resultados dos exemplos estaticamente determinados.

7 CONCLUSÃO

Aplicou-se a abordagem preditor-corretor para obtenção do sistema de equações constitutivas para o cristal CFC em EPD equivalente de Rice (1987). Demonstrou-se que a relação constitutiva cristalina não muda com a orientação dos sistemas efetivos. A relação constitutiva é não singular para a faixa de valores apresentados.

A regra de endurecimento de Taylor é incondicionalmente solúvel e bem condicionada para parâmetros materiais reais. O endurecimento hiperbólico leva à mal-condicionamento do sistema, sobretudo para grandes deslizamentos, devido à rápida diminuição do endurecimento com a deformação plástica. O mesmo não ocorre com o endurecimento em potência, cujo número de condicionamento tem comportamento assintótico a medida que o deslizamento nos sistemas efetivos aumenta.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio do Governo Brasileiro através de bolsas do CNPq e CAPES.

REFERÊNCIAS

- Asaro, R. J., & Rice, J. R., 1977. Strain localization in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25(5), 309-338.
- Asaro, R. J., 1979. Geometrical effects in the inhomogeneous deformation of ductile single crystals. *Acta Metallurgica*, 27(3), 445-453.
- Bittencourt, E., Needleman, A., Gurtin, M. E., & Van der Giessen, E., 2003. A comparison of nonlocal continuum and discrete dislocation plasticity predictions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(2), 281-310.
- Cleveringa, H. H. M., Van der Giessen, E., & Needleman, A., 2000. A discrete dislocation analysis of mode I crack growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48(6), 1133-1157.
- Columbus, D., & Grujicic, M., 2002. A comparative discrete-dislocation/nonlocal crystal-plasticity analysis of plane-strain mode I fracture. *Materials Science and Engineering: A*, 323(1), 386-402.
- Drugan, W. J., 2001. Asymptotic solutions for tensile crack tip fields without kink-type shear bands in elastic-ideally plastic single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9), 2155-2176.
- Ewing, J. A., & Rosenhain, W., 1899. Experiments in micro-metallurgy: effects of strain. Preliminary notice. *Proceedings of the Royal Society of London*, 65(413-422), 85-90.
- Gurtin, M.E., 2002. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *J. Mech. Phys. Solids* 50, 5-32.
- Hirth, J. P., & Lothe, J., 1982. *Theory of dislocations*.
- Hutchinson, J. W., 1970, October. Elastic-plastic behaviour of polycrystalline metals and composites. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (Vol. 319, No. 1537, pp. 247-272). The Royal Society.

- Juul, K. J., Nielsen, K. L., & Niordson, C. F., 2017. Steady-state crack growth in single crystals under Mode I loading. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 101, 209-222.
- Khan, A. S., & Huang, S., 1995. *Continuum theory of plasticity*. John Wiley & Sons.
- Niordson, C. F., & Kysar, J. W., 2014. Computational strain gradient crystal plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 62, 31-47.
- Peirce, D., Asaro, R. J., & Needleman, A., 1982. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals. *Acta metallurgica*, 30(6), 1087-1119.
- Rice, J. R., 1987. Tensile crack tip fields in elastic-ideally plastic crystals. *Mechanics of Materials*, 6(4), 317-335.
- Saeedvafa, M., & Rice, J. R., 1989. Crack tip singular fields in ductile crystals with taylor power-law hardening: II: Plane strain. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 37(6), 673-691.
- Steinmann, P., & Stein, E., 1996. On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 129(3), 235-254.
- Taylor, G. I., & Elam, C. F., 1923, March. Bakerian lecture. the distortion of an aluminium crystal during a tensile test. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* (Vol. 102, No. 719, pp. 643-667). The Royal Society.
- Taylor, G. I., & Elam, C. F., 1926. The distortion of iron crystals. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 112(761), 337-361.
- Taylor, G. I., 1934. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I. Theoretical. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 145(855), 362-387.
- Van der Giessen, E., Deshpande, V. S., Cleveringa, H. H. M., & Needleman, A., 2001. Discrete dislocation plasticity and crack tip fields in single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 49(9), 2133-2153.