

文章编号: 1000-0887(2005) 01-0111-09

率相关晶体塑性模型的 塑性各向异性分析

张 光¹, 张克实¹, 冯 露²

(1. 西北工业大学 工程力学系, 西安 710072;
2. 上海交通大学 建工学院 工程力学系, 上海 200240)

(王彪推荐)

摘要: 在 Sama 和 Zacharia 的工作基础上, 改进了单晶晶体弹粘塑性本构模型的积分算法, 并采用改进的欧拉法结合迭代方法求解, 特点是稳定性好计算效率较高 然后用上述模型及算法研究了: 1) 在单向拉伸和平面应变压缩变形下单晶塑性各向异性的特点; 2) 晶体模型中的主要材料参数(应变率敏感指数 m 和潜硬化比率 q) 和加载应变率对单晶塑性各向异性的影响; 3) 沿不同的晶体方向加载对滑移系启动的影响

关键词: 本构模型; 晶体塑性; 各向异性
中图分类号: O334; TG113.25 **文献标识码:** A

引 言

金属通常都是多晶体, 多晶体的变形是与其中各晶粒的变形行为相关的, 研究金属单晶体的变形能使我们掌握金属的变形过程, 有助于进一步了解多晶的变形, 另外单晶材料在工程上的应用也日益广泛, 如单晶高温合金涡轮叶片, 单晶导体等 晶体的塑性变形主要变形机理是晶体在一定的晶面上沿一定的晶向借助于位错的运动而滑移 在一定的条件下, 滑移系的数量是有限的, 所以单晶的力学行为是取向相关的

描述晶体塑性各向异性的模型主要有宏观唯象模型(如 Hill 模型等)和基于滑移机理的晶体塑性模型 晶体塑性模型初始由 Taylor 和 Elam^[1] 建立, 后经 Hill 和 Rice^[2] 发展并用于有限变形分析, 为了避免率无关模型中开动滑移系的不完全确定问题, Peirce^[3] 等采用了率相关本构关系 此后的许多关于单晶行为的本构描述大多是建立上述工作基础上^[4-9], 这些公式的推导应用了变形梯度的乘法分解^[10], 将变形梯度分解成弹性变形梯度和塑性变形梯度, 弹粘塑性方程通常是表达在中间构形上^[11,4-6], 这些方程向当前构形变换得到当前构形下的晶体响应 晶体本构方程的求解已有许多积分方法^[11,3-8], 对于表达在中间构形上的本构方程, 当前方法是用隐式或半隐式积分本构方程, 在控制方程中根据变量(在[4]中是应力, 在[5]中是

收稿日期: 2003_04_08; 修订日期: 2004_09_17

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50371070); 航空科学基金资助项目(01C53015)

作者简介: 张光(1963), 男, 江西南昌人, 副教授, 主要从事材料非弹性力学行为的研究(联系人, Tel: + 86_29_88493431_212, Fax: + 86_29_88491000; E-mail: nwpuzg@163.com)

滑移系剪切率, 在文[6]中是塑性变形梯度) 选取不同, 积分方法有所不同 如 Sama 和 Zacharia^[11] 选择弹性变形梯度作为控制方程的变量, 并用后退欧拉法求解, 这种方法简单、直接

本文所提出的晶体塑性本构方程的算法, 是对文[11]中算法的改进, 不同之处是用改进的欧拉法和 Newton_Raphson 方法对弹性变形梯度演化方程求解 晶体塑性模型是基于晶体的塑性变形的物理机理能够描述晶体的各向异性力学行为 本文用模型分析 FCC 单晶的塑性各向异性有两个特点, 一是考虑了平面应变压缩变形(轧制); 二是采用不同取向的等效应力应变曲线和不同等效应变下的等效应力在晶体各取向上分布来共同描述晶体的塑性各异性 通过计算分析得到了一些有意义的结果

1 本构模型

按乘法分解, 总的变形梯度 F 表示为

$$F = F^* F^P, \det F^* > 0, \quad (1)$$

$$F^* = R^* U^*, \quad (2)$$

式中 F^P 是塑性变形梯度, 假设塑性变形过程中体积不变, 则 $\det F^P = 1$ F^* 是弹性变形梯度, R^* 表示点阵旋转张量, U^* 表示晶格畸变的右伸长张量 考虑(1)式, 现时构形的速度梯度张量为

$$L = \dot{F}^* F^{*-1} + F^* L^P F^{*-1}, \quad (3)$$

其中塑性变形梯度为

$$L^P = \dot{F}^P F^{P-1} = P, \quad P = s \otimes m, \quad (4)$$

式中 $\dot{\gamma}$ 表示第 α 滑移系的滑移剪切率, 施密特因子张量 P 表示为中间构形第 α 滑移系的滑移方向单位矢量 s 与该滑移面的单位法向矢量 m 的张量积

单晶体弹性本构关系在中间构形上可以表示为

$$T^* = I[E^*], \quad E^* = \frac{1}{2}(C^* - I), \quad C^* = F^{*T} F^*, \quad (5)$$

$I[E^*]$ 表示四阶弹性张量 I 与格林应变张量 E^* 的双点积, 用张量的分量表示为 $l_{ijkl} E_{kl}^*$ I 是二阶单位张量 T^* 是第二类 Piola_Kirchoff 应力, 与柯西应力 (Cauchy) 的关系为

$$T^* = (\det F^*) F^{*-1} F^{*-T} \quad (6)$$

常用的一种单晶粘塑性本构关系用(4)式中的 P 和 $\dot{\gamma}$ 滑移系上的分切剪应力 τ 及临界分切剪应力 τ^0 来描述

$$\tau = \tau^0 \left| \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_0} \right|^{1/m} \text{sign}(\dot{\gamma}), \quad (7)$$

式中 m 为应变率敏感指数, τ^0 是参考剪切应变率 $\dot{\gamma}_0$ 在中间构形上, 分切剪应力 τ 可表示为二阶张量 $(C^* T^*)$ 与二阶张量 P 的双点积, 表示为

$$\tau = (C^* T^*) P, \quad (8)$$

这里硬化模型采用双参数硬化模型^[3], 临界分切剪应力 τ^0 演化方程可表示为

$$\dot{\tau}^0 = h | \dot{\gamma} |, \quad (9)$$

$$h = qh + (1 - q) h_0, \quad (10)$$

$$h = h_0 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{h_0}{s - 0} \right), \quad (11)$$

$$= \quad | \quad |, \quad (12)$$

式中 h_0 , s 是材料参数, 0 是所有滑移系上临界分切剪应力的初始值 q 是潜硬化比率是 Kronecker 符号

由(3)、(4)可得弹性变形梯度演化方程

$$\mathbf{F}^* = \mathbf{L}\mathbf{F}^* - \mathbf{F}^* \mathbf{L}^p \quad (13)$$

2 计算方法

给定变形速度梯度 \mathbf{L} , 求任何时刻单晶体的应力、应变, 硬化及晶体方向, 应对非线性方程(13)和(9)进行数值积分. 用改进的欧拉法^[12]将(13)式离散成时刻 t 到 $t + \Delta t$ 的增量形式

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{t+\Delta t}^* &= \mathbf{F}_t^* + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{L}_{t+\Delta t} \mathbf{F}_{t+\Delta t}^* - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_{t+\Delta t}^* \left(\mathbf{L}_{t+\Delta t} \mathbf{P} \right) + \\ &\quad \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{L}_t \mathbf{F}_t^* - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_t^* \left(\mathbf{L}_t \mathbf{P} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

在上式中, 假设 t 时刻的变形梯度 \mathbf{F}_t^* , 硬化 $\hat{\gamma}_t$ 已知, 给定变形速度梯度 $\mathbf{L}_{t+\Delta t}$, 将硬化 $\hat{\gamma}$ 固定在当前值, 那么用隐式迭代法可求 $\mathbf{F}_{t+\Delta t}^*$

考虑到硬化 $\hat{\gamma}$ 的上述假设, 在 $t + \Delta t$ 时刻(7)、(8)、(5)、(6)分别表示为

$$\hat{\gamma}_{t+\Delta t} = 0 \left[\frac{t+\Delta t}{\hat{\gamma}_t} \right] \left| \frac{t+\Delta t}{\hat{\gamma}_t} \right|^{1/m-1}, \quad (15)$$

$$\mathbf{C}_{t+\Delta t}^* = (\mathbf{C}_{t+\Delta t}^* \mathbf{T}_{t+\Delta t}^*) \mathbf{P}, \quad (16)$$

$$\mathbf{E}_{t+\Delta t}^* = \frac{1}{2} (\mathbf{C}_{t+\Delta t}^* - \mathbf{I}), \quad \mathbf{C}_{t+\Delta t}^* = \mathbf{F}_{t+\Delta t}^{*\top} \mathbf{F}_{t+\Delta t}^*, \quad (17)$$

$$\mathbf{T}^* = \mathbf{I}[\mathbf{E}_{t+\Delta t}^*] \quad (18)$$

利用 Newton-Raphson 方法求解方程(14), 它的第 k 次迭代残值 \mathbf{R}^k 为

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^k &= \mathbf{F}_k^* - \mathbf{F}_t^* - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{L} \mathbf{F}_k^* + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_k^* \left(\mathbf{L} \mathbf{P} \right) - \\ &\quad \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{L}_t \mathbf{F}_t^* + \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_t^* \left(\mathbf{L}_t \mathbf{P} \right) \end{aligned} \quad (19)$$

其数值迭代格式为

$$\mathbf{D}\mathbf{R}^k(\mathbf{F}_k^*)[\mathbf{F}_k^*] = -\mathbf{R}^k, \quad (20)$$

$$\mathbf{F}_{k+1}^* = \mathbf{F}_k^* + \mathbf{F}_k^*, \quad (21)$$

式中 $\mathbf{D}\mathbf{R}^k(\mathbf{F}_k^*)$ 是四阶张量, 表示 $\mathbf{D}\mathbf{R}^k$ 对 \mathbf{F}_k^* 求导, 通过推导, (19)式左边表示为

$$\begin{aligned} \mathbf{D}\mathbf{R}^k(\mathbf{F}_k^*)[\mathbf{F}_k^*] &= \mathbf{F}_k^* - \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{L} \mathbf{F}_k^* + \\ &\quad \frac{1}{2} \Delta t \mathbf{F}_k^* \left(\begin{matrix} N_s \\ \mathbf{P} \end{matrix} \right) + \frac{1}{2} \mathbf{F}_k^* \mathbf{G}_k^*, \end{aligned} \quad (22)$$

$$\mathbf{G}_k^* = \mathbf{L}[\mathbf{T}_k^*], \quad (23)$$

$$\mathbf{L}_k = \frac{d\mathbf{K}}{d\mathbf{P}}(\mathbf{P}, \mathbf{P}), \quad (24)$$

$$\mathbf{T}_k^* = (\mathbf{F}_k^{*\top} \mathbf{F}_k^* + \mathbf{F}_k^* \mathbf{F}_k^{*\top}) \mathbf{T}_k^* + \mathbf{C}_k^* \mathbf{I}[\mathbf{F}_k^{*\top} \mathbf{F}_k^*] \quad (25)$$

由(22)~(25)式可求四阶张量 $DR^k(F_k^*)$, 用分量形式表示为

$$D_{ijkl} = D_{ijkl}^0 + D_{ijkl}^1 + D_{ijkl}^2 + D_{ijkl}^3, \quad (26)$$

其中

$$D_{ijkl}^0 = \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{1}{2} t L_{ik} \delta_{jl} + \frac{1}{2} t_{il} L_{ij}^p, \quad (27)$$

$$D_{ijkl}^1 = \frac{1}{2} t F_{ip}^* \rho_{jlm} F_{kl}^* T_{ln}^*, \quad (28)$$

$$D_{ijkl}^2 = \frac{1}{2} t F_{ip}^* \rho_{jmn} F_{km}^* T_{ln}^*, \quad (29)$$

$$D_{ijkl}^3 = \frac{1}{2} t F_{ip}^* \rho_{jmn} C_{mqnls}^* F_{ks}^* \quad (30)$$

由(20)和(22)~(26)可求出 F_k^* 的九个分量, 然后由(21)式可计算 F_{k+1}^* , 重复上述迭代过程直至满足收敛要求, 得到 $F_{t+\Delta t}^*$, 然后利用方程(9)更新滑移系上临界分切剪应力

$$\hat{\tau}_{t+\Delta t} = \hat{\tau}_t + \hat{\tau}'_{t+\Delta t}, \quad (31)$$

再分别用(2)式, (15)~(18)式和(6)式计算 $R_{t+\Delta t}^*$, $T_{t+\Delta t}^*$, $\tau_{t+\Delta t}$

3 计算结果及分析

假设晶体弹性是各向同性的, 四阶弹性张量可以表示为

$$l_{ijkl} = (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{jk} \delta_{il}) + \lambda \delta_{ij} \delta_{kl}$$

式中 λ 和 μ 是拉梅常数, 该模型材料是 Cu, 面心立方, 滑移系为 $\{111\} \langle 110 \rangle$, 滑移系符号如表 1 所示, 材料参数^[3]为: $\mu = 23.4 \text{ GPa}$, $\lambda = 35.1 \text{ GPa}$, $m = 0.01$, $\dot{\gamma}_0 = 0.001 \text{ s}^{-1}$, $q = 1.0 \sim 1.4$, $h_0 = 541.48 \text{ MPa}$, $\tau_0 = 60.84 \text{ MPa}$, $\tau_s = 109.51 \text{ MPa}$ 假设拉伸变形时变形速度梯度(单位 s^{-1}) $L_{11} = L_{22} = -0.5$, $L_{33} = 1.0$, 其他分量为零; 而平面应变压缩变形 $L_{11} = 1.0$, $L_{33} = -1.0$, 其他分量为零

表 1 滑移系符号

符号	滑移系	符号	滑移系
A1	(111)[01 $\bar{1}$]	C1	($\bar{1}$ 11)[01 $\bar{1}$]
A2	(111)[$\bar{1}$ 01]	C4	($\bar{1}$ 11)[101]
A5	(111)[1 $\bar{1}$ 0]	C6	($\bar{1}$ 11)[$\bar{1}$ 10]
B3	($\bar{1}$ 11)[0 $\bar{1}$ 1]	D3	(111)[0 $\bar{1}$ 1]
B4	($\bar{1}$ 11)[101]	D2	(111)[101]
B5	($\bar{1}$ 11)[$\bar{1}$ 01]	D6	(111)[110]

为了全面分析上述模型对晶体的各向异性描述能力及算法的初步验证, 沿晶体各晶向进行拉伸变形模拟, 而由于 FCC 晶体的对称性, 在极三角形[001]、[101]、[111]中, 选取一系列晶向, 沿这些方向对晶体进行拉伸变形, 得到等效应变分别为 0.005 8, 0.01, 0.1, 0.3 时的等效应力 (Mises 等效应力与初始临界分切剪应力之比) 与晶体取向的分布关系以及沿一些典型晶向的拉伸等效应力应变曲线如图 1、图 2 所示。由图 1 可以看出, 随着晶体方向的不同, 一定等效应变下等效应力的大小有很大的变化。当等效应变为 0.005 8 时, [111] 方向的等效应力最大为 3.521 4, 而 [102] 方向的等效应力最小为 2.400 5, [101] 方向的等效应力为 3.056, 比 [111] 方向的小; 当等效应变为 0.01 时, 等效应力最大值的方向已发生变化, 已变为 [101] 方向, 其值为

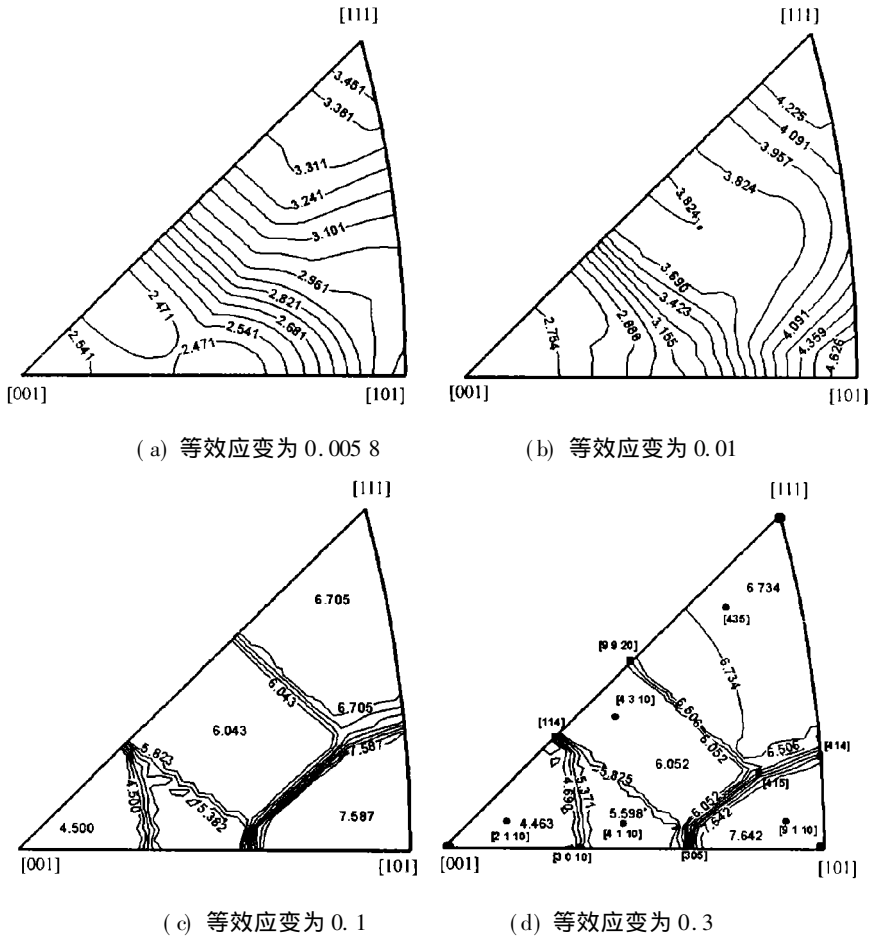


图 1 拉伸等效应力与取向的关系 $m = 0.005, q = 1.0, \dot{\epsilon} = 1.0 \text{ s}^{-1}$

4.7597, 而[111]方向的值为4.2941, 而最小值的方向逐渐向[001]方向偏移, 最小值为2.6230。随着拉伸等效应变的增大, 晶体各方向的拉伸等效应力及相同应变下的等效应力的最大值与最小值的差值也不断增加, 但当应变增大到某一值时, 应变的继续增大, 等效应力似乎不再增加, 应力达到饱和, 如图2所示, 随着晶体方向的不同, 晶体的加工硬化速度及应力达到饱和时的应变也不同, [101]方向的硬化能力最强, 硬化速度最快, [111]方向次之, 而[001]方向的硬化能力最弱, 硬化速度最慢; 当等效应变约大于0.1时, 饱和应力水平并不完全随晶向的变化而变化, 而是分成五级, 在图2上形成5条近似水平线, 而在极三角形中形成图1(c)所示的五个应力响应不同的区域, 各区域的等效应力几乎相等; 此后随着应变的增加, 各区域中的等效应力变化很小, 各区域的大小略有变化, 如图1(d)所示, 但由图1(d)和图2可以看出在各区域边界上的晶向上拉伸, 其拉伸应力应变曲线呈现明显的拉伸软化或硬化, 如[114]、[305]、[415]等

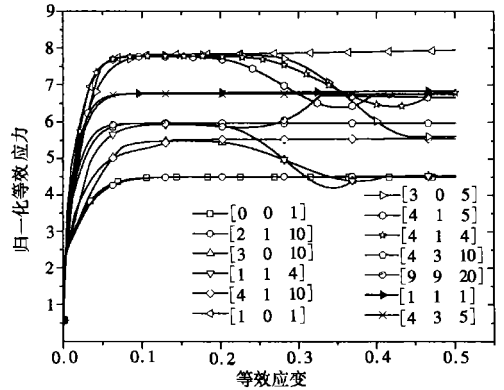


图 2 晶体取向对铜单晶拉伸应力-应变曲线的影响 ($m = 0.005, q = 1.0, \dot{\epsilon} = 1.0 \text{ s}^{-1}$)

随着拉伸加载晶向的不同, 晶体滑移系的启动状况不一样, 沿[001]方向拉伸, 晶体有8个滑移系(A1, A2, B3, B4, C1, C4, D3, D3)同时启动; 沿[111]方向有6个滑移系(B3, B4, C4, C6, D3, D6)同时启动, 而沿[101]方向有8个滑移系分两组, 第一组A1, A5, D3, D6是主要滑移系先启动, 而第2组B3, B5, C1, C6是次要滑系后启动; 沿其他方向, 可启动滑移系一般6~8个, 分多组先后启动

在上述单晶体粘塑性模型中, 主要参数的改变会影响模型对晶体硬化能力的描述, 如增大应变率敏感指数 m 、潜硬化比率 q , 有利于提高模型

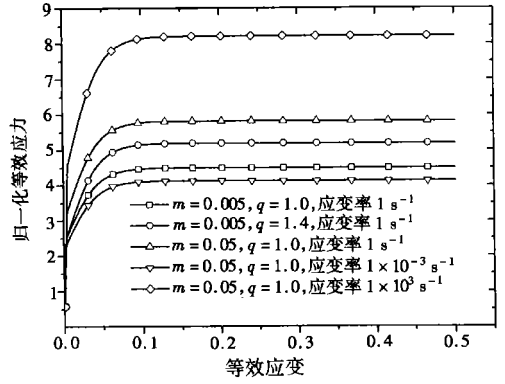
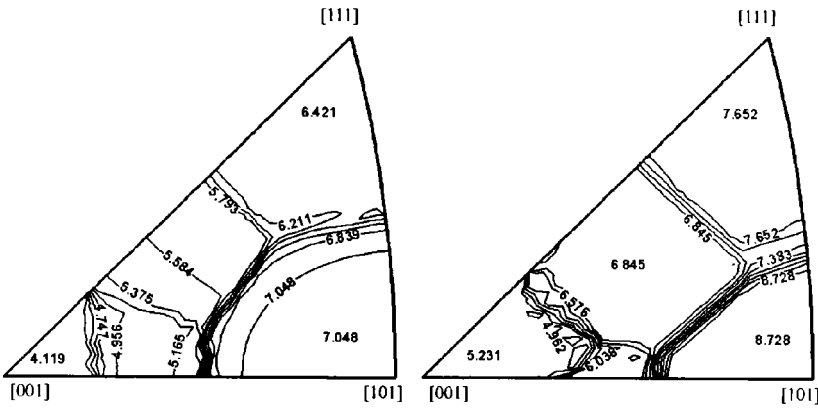


图3 m, q 和 对[0 0 1]方向拉伸应力-应变曲线的影响



(a) $m = 0.05, q = 1.0, \dot{\epsilon} = 0.01 \text{ s}^{-1}$ (b) $m = 0.005, q = 1.0, \dot{\epsilon} = 1.0 \text{ s}^{-1}$

图4 m, q 和 对等效应力分布的影响(等效应变为0.1)

的硬化能力; 同样, 加载条件如应变率 $\dot{\epsilon}$ 的变化, 对晶体模型的应力应变响应也有很大的影响, 应变率 $\dot{\epsilon}$ 越大, 应变硬化越强, 应力水平越高, 如图3所示。比较图4、图1(c)可以看出 m, q 和 $\dot{\epsilon}$ 对拉伸等效应力与取向关系的影响, 在极三角形中, 等效应力的大小随 m, q 和 $\dot{\epsilon}$ 的变化而变化, 而应力的分布仍呈现五个等应力区, 各区域的相对硬化能力没有发生变化, [101]区域方向的硬化能力最强, [111]区域次之, 而[001]区域最弱, 但部分区域

的大小与边界的形状有所变化, 如图4(a)中的[101]区域的边界向中部迁移, 区域面积扩大, 而图4(b)中与[001]相邻区域的面积显著缩小。下面考虑平面应变压缩变形时单晶塑性各向异性的特点

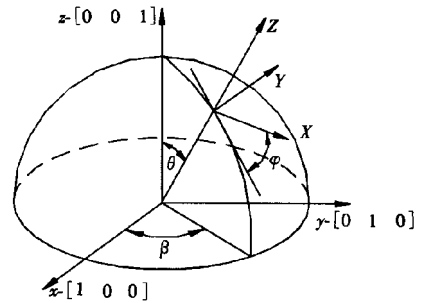


图5 欧拉角的定义

假设晶体坐标系 xyz 与整体坐标系 XYZ 之间的关系用图5所示欧拉角表示, 其中 Z 轴是极三角形[001]、[101]、[111]中的晶面法线。角 θ 的改变对晶体的拉伸变形没有影响, 即任一方向的拉伸等效应力应变响应和任一等效应变下的等效应力与取向的关系不受 θ 角影响; 但角 ϕ 的变化对单晶体在平面应变压缩变形下的塑性各向异性影响显著, 如图6所示, 由该图可以

看出: 随着 θ 角的变化, 等效应力相同的区域在不断地改变, 各区域的等效应力的大小也在变化, $\theta = 0$ 时 $[101]$ 区域比 $[111]$ 区域的等效应力高, 硬化能力强, 而 $\theta = 30$ 时 $[101]$ 区域与 $[111]$ 区域的等效应力相等。与拉伸情况类似的是 $[001]$ 所在的区域, 晶体的应变硬化能力仍是最弱的

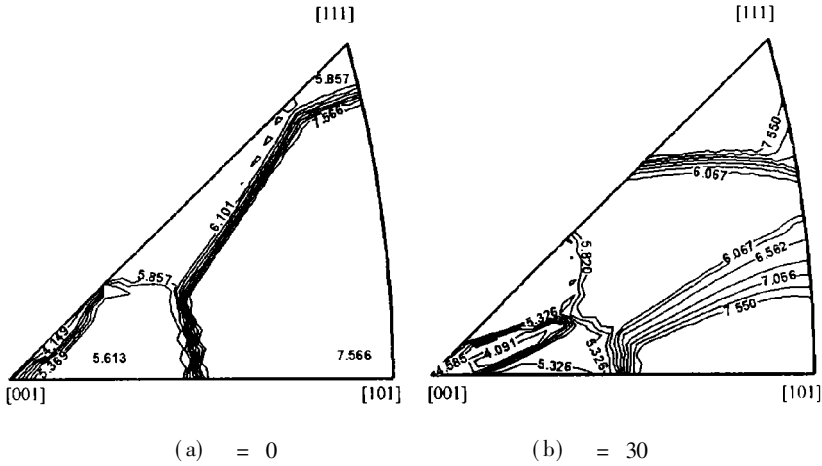


图 6 平面应变压缩应变下, θ 的变化对等效应力与晶体取向关系的影响 $m = 0.005, q = 1.0$, 等效应变为 0.1

在拉伸时欧拉角 θ 的变化对晶体滑移系的启动状况没有影响, 但在平面应变压缩时, θ 的变化对晶体滑移系的启动状况有很大的影响, 当整体坐标中的 Z 轴沿晶体的 $[001]$ 方向, $\theta = 0$ 时, 晶体中有滑移系 A_2, B_4, C_4, D_2 同时启动, 而 $\theta = 30$ 晶体的启动滑移系分两组, 一组是 C_1, D_3 , 另一组是 A_1, B_3 , 前一组是主要的, 后一组是次要的。当 Z 轴沿晶体的 $[101]$ 方向, $\theta = 0$ 时, 有 $A_1, A_5, B_3, B_5, C_1, C_6, D_3, D_6$ 同时启动, 而 $\theta = 30$ 时, 启动滑移系分两组, 主要的一组是 A_5, D_3 , 另一组是 A_1, D_6 , 当 Z 轴沿晶体的 $[111]$ 晶向,

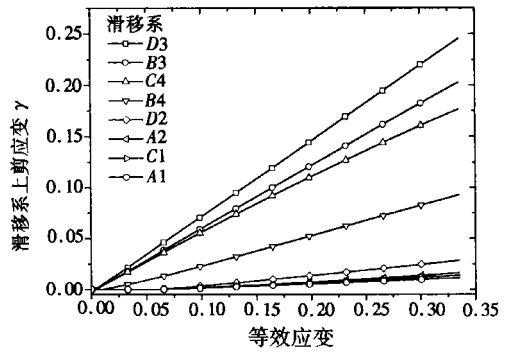


图 7 Z 轴在 $[111]$ 方向上 $\theta = 30$ 时激活滑移系应变曲线

$\theta = 0$ 时, 滑移系分成两组, 主要的一组是 C_6, D_6 , 另一组 B_3, B_4 是次要, 而当 $\theta = 30$ 时, 启动滑移系如图 7 所示, 8 个滑移系先后启动, 对变形影响最大的滑移系是 D_3

4 结 论

本文改进了有限变形下单晶体弹粘塑性本构模型的积分算法, 并用于计算 FCC 单晶晶体的塑性各向异性。它是基于变形梯度乘法分解, 将变形梯度分解成弹性部分和塑性部分。变形历史以变形速度梯度给出, 推导弹性变形梯度演化方程, 这种形式简单、直接。在弹性变形梯度微分方程求解时, 采用改进的欧拉法是因为它比后退欧拉法的局部截断误差高一阶, 理论上计算精度要高一些。

然后用上述本构模型及算法模拟分析了单晶在单向拉伸和平面应变压缩变形下的塑性各向异性, 讨论了加载应变速率、模型的应变率敏感指数 m 和潜硬化比率 q 对模型单晶塑性各向

异性的影响 计算结果表明:

1) 模型所描述的 FCC 单晶在多滑移情况下各向拉伸应力应变响应取向相关, 随着等效应变的增大, 在极三角形中逐渐形成大小不同的五个等应力区, $[101]$ 区的应力最大, $[001]$ 区的应力最小

2) 在区域交界上拉伸应力应变曲线不是饱和的, 应力在其相邻区域之间变化, 意味着这些取向上的变形可能是不稳定的

3) 平面应变压缩时轧制方向 (RD) 的变化对单晶体塑性各向异性的性质有很大的影响

4) 应变速率、率敏感指数 m 和潜硬化比率 q 的变化对取向应力应变响应有很大的影响, 但对极三角形中等应力区域数量及相对大小影响不大

5) 加载路径及取向对滑移系启动有很大的影响

致谢 本工作还得到西北工业大学博士论文创新基金资助, 在此表示衷心感谢

[参 考 文 献]

- [1] Taylor G I, Elam C F. The plastic extension and fracture of aluminum crystals[J]. Proc Roy Soc Lond, 1925, **108**(1): 28-51.
- [2] Hill R, Rice J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain[J]. J Mech Phys Solids, 1972, **20**(6): 401-413.
- [3] Peirce D, Asaro R J, Needleman A. Material rate sensitivity and localized deformation in crystalline solids[J]. Acta Metall, 1983, **31**(12): 1951-1976.
- [4] Kalidindi S R, Bronkhorst C A, Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals[J]. J Mech Phys Solids, 1992, **40**(3): 537-569.
- [5] Steinmann P, Stein E. On the numerical treatment and analysis of finite deformation ductile single crystal[J]. Comput Methods Appl Mech Eng, 1996, **129**(3): 235-254.
- [6] Maniatty A M, Dawson P R, Lee Y S. A time integration algorithm for elasto-viscoplastic cubic crystals applied to modeling polycrystalline deformation[J]. Int J Numer Methods Engrg, 1992, **35**(10): 1565-1588.
- [7] Rashid M M, Nemat-Nasser S. A constitutive algorithm for rate dependent crystal plasticity[J]. Comput Methods Appl Mech Eng, 1990, **94**(2): 201-228.
- [8] Mathur K K, Dawson P R. On modeling the development of crystallographic texture in bulk forming processes[J]. Int J Plast, 1989, **5**(1): 69-74.
- [9] FENG Lu, ZHANG Ke-shi, ZHANG Guang, et al. Anisotropic damage model under continuum slip crystal plasticity theory for single crystals[J]. International Journal of Solids and Structures, 2002, **39**(20): 5279-5293.
- [10] Lee E H. Elastic-plastic deformation at finite strains[J]. J Appl Mech, 1969, **36**(1): 1-6.
- [11] Sarma G B, Zacharia T. Integration algorithm for modeling the elasto-viscoplastic response of polycrystalline materials[J]. J Mech Phys Solids, 1999, **47**(6): 1219-1238.
- [12] 聂铁军. 数值计算方法[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 1990.

ZHANG Guang¹, ZHANG Ke_shi¹, FENG Lu²

(1. Department of Applied Mechanics, Northwestern Polytechnical University,
Xi'an, 710072, P.R.China;

2. Department of Mechanics, School of Civil Engineering and Mechanics,
Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240, P.R.China)

Abstract: An algorithm for single crystals was developed and implemented to simulate plastic anisotropy using a rate_dependent slip model. The proposed procedure was a slightly modified form of single crystal constitutive model of Sama and Zacharia. Modified Euler method, together with Newton_Raphson method was used to integrate this equation which was stable and efficient. The model together with the developed algorithm was used to study three problems. First, plastic anisotropy was examined by simulating the crystal deformation in tension and plane strain compression respectively. Secondly, the orientation effect of some material parameters in the model and applied strain rate on plastic anisotropy for single crystal also is investigated. Thirdly, the influence of loading direction on the active slip system was discussed.

Key words: constitutive behavior; crystal plasticity; anisotropy