

UNIVERSITATEA BUCUREȘTI
FACULTATEA DE MATEMATICĂ ȘI INFORMATICĂ

**MODELE MATEMATICE PENTRU
MATERIALE CU MICROSTRUCTURĂ.**

APLICAȚII

- REZUMAT -

Conducător științific: Prof. Dr. SANDA CLEJA-ȚIGOIU
Doctorand: RAISA PAȘCAN

BUCUREȘTI
2013

Introducere

Scopul acestei teze vizează următoarele aspecte:

1. Modelarea în cadrul mecanicii mediilor continue, deformabile, cu microstructură, a comportamentului materialelor elasto-plastice cu deformații finite;
2. Modelarea constitutivă a defectelor și determinarea ecuațiilor de evoluție pentru descrierea acestora:
 - Punerea în evidență a efectelor datorate prezenței defectelor de tip dislocații;
 - Înțelegerea mecanismului de deformare plastică prin alunecarea atomilor în sistemele de alunecare, caracterizate de planele și direcțiile respective de alunecare în sistemele cristalografice;
3. Formularea problemelor cu date inițiale și la limită;
 - Elaborarea metodelor și simulărilor numerice;
 - Interpretarea rezultatelor numerice.

CAPITOLUL 1

Modele vâscoplastice pentru materiale cu structură cristalină

Se va prezenta cadrul constitutiv al materialelor vâscoplastice cu structură cristalină, care constituie fundamentul dezvoltărilor teoretice și al aplicațiilor numerice, realizate în prezenta teză. Se reformulează principiul de nebilanțare a energiei libere în prezența defectelor de tip dislocații, cu măsurii tensoriale și scalare. Se postulează ecuații de evoluție nelocale care sunt compatibile cu inegalitatea redusă de disipare. Ecuațiile de evoluție de tip ecuații nelocale descriu evoluția distorsiunea plastică și densitățile scalare de dislocații.

Se expun rezultatele obținute în articolul Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013b] în care se introduce ipoteza că distorsiunea plastică se reprezintă printr-o lege de curgere în sisteme cristalografice de alunecare, lege de curgere de tip Schmid. Se deduc consecințe care decurg din cadrul constitutiv al elasto-plasticității finite de ordinul doi cu măsurii tensoriale și scalare de dislocație, dezvoltat în Cleja-Țigoiu [2013]. Ca o primă consecință se demonstrează că ecuațiile de bilanț asociate micro-forțelor pot fi reprezentate într-o formă echivalentă cu cea propusă de Gurtin [2002]. O nouă ecuație de evoluție pentru vitezele de forfecare plastică asociată cu expresia tensiunii reduse efective, pe baza formalismului adoptat de Teodosiu și Sidoroff [1976].

Se descrie un model cu efecte non-Schmid propus în articolul Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013c]. În acest articol modelul constitutiv este reformulat în ipoteza că densitățile de dislocație și gradientul acestora influențează comportamentul elasto-plastic al materialelor cu structură cristalină. Se reformulează prin intermediul vectorului de tensiune generalizat expresiile vitezelor plastice de forfecare, vitezelor normale de deformare plastică și a vitezei de compresibilitate.

Fie gradientul în coordonatele locale și derivata covariantă a unui vector \mathbf{Y} ,

$$\nabla \mathbf{Y} = \frac{\partial Y^a}{\partial x^b} \mathbf{e}_a \otimes \mathbf{e}^b, \quad \nabla_{\Gamma} \mathbf{Y} = \left(\frac{\partial Y^a}{\partial x^b} + Y^c \Gamma_{cb}^a \right) \mathbf{e}_a \otimes \mathbf{e}^b \quad (1.1)$$

în raport cu o conexiune afină dată, definită în sistemul de coordonate prin

$$\Gamma = \Gamma_{mk}^i \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}^m \otimes \mathbf{e}^k. \quad (1.2)$$

Vom introduce un tensor de ordinul trei generat de un câmp tensorial de ordinul trei Γ , împreună cu tensorii de ordinul doi $\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2$:

$$(\Gamma[\mathbf{F}_1, \mathbf{F}_2] \mathbf{u}) \mathbf{v} = (\Gamma(\mathbf{F}_1 \mathbf{u})) \mathbf{F}_2 \mathbf{v}, \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}. \quad (1.3)$$

Utilizăm 3 tipuri de configurații ale corpului \mathcal{B} , k , χ și \mathcal{K} :

- k - configurația de referință considerată fixă, globală, a corpului \mathcal{B} , $k(\mathcal{B}) \subset \mathcal{E}$ spațiul euclidian.
- Pentru orice mișcare a corpului \mathcal{B} , $\chi : \mathcal{B} \times R \rightarrow \mathcal{E}$, $\chi(\cdot, t)$ reprezintă configurația deformată la momentul de timp t , care este o configurație globală a corpului \mathcal{B} . Corpul este scufundat în spațiul fizic al geometriei euclidiene și geometria riemanniană este geometria spațiului material pentru corpul continuu deformabil. Geometria riemanniană a corpului este caracterizată prin conexiunea materială $\Gamma = \mathbf{F}^{-1} \nabla \mathbf{F}$, unde $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \nabla \chi(\mathbf{X}, t)$ este gradientul deformației la momentul de timp t pentru $\mathbf{X} \in \mathcal{B}$.

În elasto-plasticitatea materialelor cu deformații finite se formulează ipoteza descompunerii multiplicative a gradientului deformației în componenta elastică, \mathbf{F}^e , și cea plastică, \mathbf{F}^p cu proprietatea că $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$. Componentele \mathbf{F}^e și \mathbf{F}^p nu satisfac condiția de compatibilitate, ceea ce înseamnă că ele nu pot fi reprezentate printr-un potențial, spre deosebire de \mathbf{F} care este reprezentat prin potențialul mișcării.

- Pentru o mișcare a corpului \mathcal{B} , $\chi : \mathcal{B} \times R \rightarrow \mathcal{E}$, pentru fiecare particulă și la orice moment de timp există o configurație \mathcal{K} dependentă de timp, neolonomă, numită configurație cu torsiune. Configurația \mathcal{K} este caracterizată prin tensorul de ordinul doi \mathbf{F}^p , numit distorsiune plastică și de conexiunea plastică $\overset{(p)}{\Gamma}$ cu torsiune nenulă.

Gradientul $\nabla_{\mathcal{K}} \mathbf{F}$ în configurația cu torsiunea \mathcal{K} este calculată astfel:

$$\nabla_{\mathcal{K}} \mathbf{F} := (\nabla \mathbf{F})(\mathbf{F}^p)^{-1}.$$

În cele ce urmează, referitor la dislocații, considerăm că măsura tensorială a defectelor este dată, de așa numita conexiune de tip Bilby (vezi Bilby [1960]), prin formula

$${}^{(p)}\mathcal{A} := (\mathbf{F}^p)^{-1} \nabla \mathbf{F}^p,$$

introdusă în Cleja-Țigoiu [2007]. Torsiunea asociată cu conexiunea de tip Bilby este o măsură a incompatibilității distorsiunii plastice, și anume

$$({}^{(p)}\mathcal{A} \mathbf{u}) \mathbf{v} - ({}^{(p)}\mathcal{A} \mathbf{v}) \mathbf{u} = ((\mathbf{F}^p)^{-1} \text{curl} \mathbf{F}^p)(\mathbf{u} \times \mathbf{v}),$$

scrisă pentru orice doi vectori (\mathbf{u}, \mathbf{v}) .

Descompunerea deformației de ordinul doi, $\mathbf{\Gamma}$ asociată cu mișcarea corpului \mathcal{B} , se descompune în componentele de deformație elastică și plastică de ordinul doi conform formulei

$$\mathbf{\Gamma} = \mathbf{\Gamma}^{(p)} + (\mathbf{F}^p)^{-1} \mathbf{\Gamma}^{(e)}_{\mathcal{K}} [\mathbf{F}^p, \mathbf{F}^p]$$

În urma schimbării sistemului de coordonate se deduce expresia conexiunii în raport cu configurația cu torsiune astfel

$$\mathbf{\Gamma}^{(p)}_{\mathcal{K}} = -\mathbf{F}^p \mathbf{\Gamma}^{(p)} [(\mathbf{F}^p)^{-1}, (\mathbf{F}^p)^{-1}]. \quad (1.4)$$

Relațiile de legătură dintre câmpurile de deformație referitoare la configurația \mathcal{K} și k sunt reprezentate prin

$$\mathbf{C}^e = (\mathbf{F}^e)^T \mathbf{F}^e = (\mathbf{F}^p)^{-T} \mathbf{C} (\mathbf{F}^p)^{-1}, \quad \mathbf{C} = (\mathbf{F})^T \mathbf{F}. \quad (1.5)$$

Ca o consecință a descompunerii multiplicative a lui \mathbf{F} în componentele sale elastice și plastice se obține:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \mathbf{L}^e + \mathbf{F}^e \mathbf{L}^p (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1}, \quad \mathbf{L}^e = \dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1}, \\ \text{unde } \mathbf{L} &= \dot{\mathbf{F}} (\mathbf{F})^{-1}, \quad \mathbf{L} := \nabla \mathbf{v}, \end{aligned} \quad (1.6)$$

Vom pune în evidență derivate temporale ale anumitor câmpuri care vor apărea ca argumente în funcția densitate de energie liberă în raport cu configurația de referință, de exemplu

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}} &= 2\mathbf{F}^T \{\mathbf{L}\}^S \mathbf{F}, \quad \dot{\mathbf{C}}^e = 2(\mathbf{F}^e)^T \{\mathbf{L}^e\}^S \mathbf{F}^e, \quad \{\mathbf{L}^e\}^S = \mathbf{D}^e, \quad \{\mathbf{L}^e\}^a = \mathbf{W}^e \\ \mathbf{I}^p &:= \frac{d}{dt} (\mathbf{F}^p)^{-1} \mathbf{F}^p \equiv -(\mathbf{F}^p)^{-1} \mathbf{L}^p \mathbf{F}^p, \quad \frac{d}{dt} ({}^{(p)}\mathcal{A}) = -\nabla \mathbf{I}^p + \mathbf{I}^p {}^{(p)}\mathcal{A} - {}^{(p)}\mathcal{A} [\mathbf{I}, \mathbf{I}^p]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Densitățile scalare de dislocații sunt definite în raport cu configurația de referință prin ρ^d și gradientul său $\nabla \rho^d$. Prin trecere la configurația cu torsiune, densitatea scalară de dislocații se transformă prin:

$$\rho_{\mathcal{K}}^d = \rho^d, \quad \nabla_{\mathcal{K}} \rho_{\mathcal{K}}^d = (\mathbf{F}^p)^{-T} \nabla \rho^d. \quad (1.8)$$

Derivata în raport cu timpul a gradientului densității scalare de dislocație în raport cu configurația \mathcal{K} este

$$\frac{d}{dt}(\nabla_{\mathcal{K}}(\rho_{\mathcal{K}}^d)) = (\mathbf{F}^p)^{-T} \nabla \dot{\rho}^d - ((\mathbf{F}^p)^{-1} \mathbf{L}^p)^T \nabla \rho^d = (\mathbf{F}^p)^{-T} \{\nabla \dot{\rho}^d + (\mathbf{1}^p)^T \nabla \rho^d\}. \quad (1.9)$$

Axioma 1.1 *Densitatea energiei libere este postulată a fi dependentă de deformația elastică \mathbf{C}^e , fiind dependentă de configurația cu torsiune prin partea elastică a deformației de ordinul doi $((\mathbf{F}^p)^{-1}, \mathcal{A}_{\mathcal{K}}^{(p)})$, precum și de densitatea scalară de dislocație $\rho_{\mathcal{K}}^d$ și gradientul ei $\nabla_{\mathcal{K}} \rho_{\mathcal{K}}^d$ în raport cu configurația \mathcal{K} .*

$$\psi = \psi_{\mathcal{K}}(\mathbf{C}^e, (\mathbf{F}^p)^{-1}, \mathcal{A}_{\mathcal{K}}^{(p)}, \rho_{\mathcal{K}}^d, \nabla_{\mathcal{K}} \rho_{\mathcal{K}}^d), \quad \mathbf{C}^e = (\mathbf{F}^e)^T \mathbf{F}^e \quad (1.10)$$

În cele ce urmează notăm $\tilde{\rho}$, $\hat{\rho}$, $\hat{\rho}_0$ densitățile de masă în configurațiile \mathcal{K} , χ și respectiv k .

Axioma 1.2 (Principiul de nebilanțare a energiei libere globale) *Modelul constitutiv elasto-plastic este compatibil cu ipoteza ca variația în raport cu timpul a energiei libere a oricărei părți \mathcal{P} a corpului să fie mai mică sau egală cu puterea internă consumată de partea \mathcal{P} ,*

$$\frac{d}{dt} \left(\int_{\mathcal{K}_t(\mathcal{P})} \tilde{\rho} \psi_{\mathcal{K}} dV_{\mathcal{K}} \right) \leq \mathcal{W}_{int}(\mathcal{P}, t), \quad (1.11)$$

scrisă pentru oricare proces virtual (izotermic).

Propoziția 1.1 *Comportamentul elasto-plastic al materialului este supus la restricția de a satisface în \mathcal{K} principiul de nebilanțare a energiei libere*

$$(\mathcal{P}_{int})_{\mathcal{K}} - \dot{\psi}_{\mathcal{K}} \geq 0 \quad (1.12)$$

scris pentru orice proces virtual (izoterm). Aici $(\mathcal{P}_{int})_{\mathcal{K}}$ reprezintă densitatea de masă a puterii interne.

- $(\boldsymbol{\pi}, \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{K}})$ definesc *macro-forțele* ca ansamblul tensiunii și a momentului tensiunii, raportate la configurația cu torsiune și care produc putere în timpul procesului de deformare. Macro-forțele sunt conjugate, în sensul puterii, cu viteza distorsiunii elastice și cu o măsură corespunzătoare gradientului distorsiunii elastice. Aici $\boldsymbol{\pi}$, care poate fi nesimetric, este legat de \mathbf{T} (unde \mathbf{T} este tensorul de tensiune nesimetric Cauchy), prin relațiile:

$$\mathbf{F}^e \frac{1}{\hat{\rho}} \boldsymbol{\pi} (\mathbf{F}^e)^T = \frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T}. \quad (1.13)$$

- Momentul tensiunilor $\boldsymbol{\mu}_\mathcal{K}$ transformat în raport cu configurația actuală este notat prin $\boldsymbol{\mu}$ și poate fi exprimat prin formula:

$$\frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\mu} = (\mathbf{F}^e)^{-T} \frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\mu}_\mathcal{K}[(\mathbf{F}^e)^T, (\mathbf{F}^e)^T]. \quad (1.14)$$

- Fie $\boldsymbol{\Upsilon}^p$ și $\boldsymbol{\mu}^p$ *micro-tensiunea plastică și micro-momentul*, în raport cu configurația cu torsiune \mathcal{K} , care sunt conjugate în sensul puterii cu \mathbf{L}^p și respectiv gradientul său $\nabla_\mathcal{K}\mathbf{L}^p$, calculat în configurația cu torsiune.
- Vom include în expresia puterii interne disipate în timpul procesului elasto-plastic, puterea produsă de micro-tensiuni (câmp scalar) Υ^d și a micro-momentului (câmp vectorial) \mathbf{m}^d (ambele definite în configurația cu torsiune), în conjuncție cu vitezele de variație ale densităților de dislocație $\dot{\rho}_\mathcal{K}^d$ și respectiv cu gradientul vitezei $\nabla_\mathcal{K}\dot{\rho}_\mathcal{K}$.

Observația 1.1 *Densitatea de masă a puterii interne în configurația cu torsiune este dată de expresia:*

$$\begin{aligned} (\mathcal{P}_{int})_\mathcal{K} &= \frac{1}{2\tilde{\rho}}\{\boldsymbol{\pi}\}^S \cdot \dot{\mathbf{C}}^e + \frac{1}{\tilde{\rho}}\{\boldsymbol{\pi}\}^a \cdot (\mathbf{F}^e)^T \mathbf{W}^e \mathbf{F}^e + \\ &+ \frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\mu}_\mathcal{K} \cdot \{(\mathbf{F}^e)^{-1}(\nabla_\chi \mathbf{L})[\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^e] - \nabla_\mathcal{K}\mathbf{L}^p\} + \\ &+ \frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\Upsilon}^p \cdot \mathbf{L}^p + \frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\mu}^p \cdot \nabla_\mathcal{K}\mathbf{L}^p + \frac{1}{\tilde{\rho}}\Upsilon^d \cdot \frac{d}{dt}(\rho_\mathcal{K}^d) + \frac{1}{\tilde{\rho}}\mathbf{m}^d \cdot \frac{d}{dt}(\nabla_\mathcal{K}\rho_\mathcal{K}^d), \end{aligned} \quad (1.15)$$

scrisă într-un punct material fixat. Pentru deducerea acestei relații s-a utilizat descompunerea mărimii \mathbf{L}^e în partea sa simetrică și anti-simetrică conform (1.7).

Se vor introduce tensorii nesimetrice de tip Mandel, notați prin $\boldsymbol{\Sigma}_0$ și $\boldsymbol{\Sigma}_0^p$, pentru macro-tensiuni și pentru micro-tensiuni plastice în raport cu configurația de referință

$$\frac{1}{\hat{\rho}_0}\boldsymbol{\Sigma}_0 = \frac{1}{\hat{\rho}}\mathbf{F}^T(\mathbf{T})\mathbf{F}^{-T}, \quad \frac{1}{\hat{\rho}_0}\boldsymbol{\Sigma}_0^p = \frac{1}{\tilde{\rho}}(\mathbf{F}^p)^T \boldsymbol{\Upsilon}^p (\mathbf{F}^p)^{-T}. \quad (1.16)$$

Micro și macro-momentele pot fi reprezentate în configurația de referință prin:

$$\frac{1}{\hat{\rho}_0}\boldsymbol{\mu}_0^p := (\mathbf{F}^p)^T \frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\mu}^p [(\mathbf{F}^p)^{-T}, (\mathbf{F}^p)^{-T}], \quad \frac{1}{\hat{\rho}_0}\boldsymbol{\mu}_0 := (\mathbf{F}^p)^T \frac{1}{\tilde{\rho}}\boldsymbol{\mu}_\mathcal{K} [(\mathbf{F}^p)^{-T}, (\mathbf{F}^p)^{-T}]. \quad (1.17)$$

Se pot defini trei tipuri de tensori de ordinul doi, care sunt generați de doi tensori de ordinul trei. Pentru oricare $\mathcal{A}, \mathcal{B} \in Lin(\mathcal{V}, Lin)$ și $\mathbf{X} \in Lin$ există $\mathcal{A} \odot \mathcal{B} \in Lin$, $\mathcal{A}_r \odot \mathcal{B} \in Lin$ și $\mathcal{A}_l \odot \mathcal{B} \in Lin$, vezi Cleja-Țigoiu [2010], astfel încât:

$$\begin{aligned} (\mathcal{A} \odot \mathcal{B}) \cdot \mathbf{X} &:= \mathcal{A}[\mathbf{I}, \mathbf{X}] \cdot \mathcal{B}, & (\mathcal{A} \odot \mathcal{B})_{sn} &:= \mathcal{A}_{isk} \mathcal{B}_{ink} \\ (\mathcal{A}_r \odot \mathcal{B}) \cdot \mathbf{X} &:= \mathcal{A} \cdot \mathbf{X} \mathcal{B}, & (\mathcal{A}_r \odot \mathcal{B})_{sn} &:= \mathcal{A}_{sjk} \mathcal{B}_{njk} \\ (\mathcal{A}_l \odot \mathcal{B}) \cdot \mathbf{X} &:= \mathcal{A} \cdot \mathcal{B} \mathbf{X}, & (\mathcal{A}_l \odot \mathcal{B})_{sn} &:= \mathcal{A}_{ijs} \mathcal{B}_{ijn}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Teorema 1.1 *Reprezentarea constitutivă a materialului elasto-plastic este supusă la restricțiile impuse de principiul de nebilanțare a energiei libere, echivalent reprezentate sub forma inegalității următoare:*

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{\hat{\rho}}(\mathbf{T}^*) \cdot \tilde{\mathbf{L}}^a + \left(\frac{1}{\hat{\rho}} \{ \mathbf{T} \}^S - 2\mathbf{F} \partial_{\mathbf{C}} \psi \mathbf{F}^T \right) \cdot \tilde{\mathbf{D}} + \frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\mu}_0 \cdot \mathbf{F}^{-1} \nabla \tilde{\mathbf{L}}[\mathbf{F}, \mathbf{F}] + \\
 & + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} (\boldsymbol{\Sigma}_0 - \boldsymbol{\Sigma}_0^p) + (\mathbf{F}^p)^T \partial_{\mathbf{F}^p} \psi \right) \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p + \{ \mathcal{A} \} \odot \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} (\boldsymbol{\mu}_0^p - \boldsymbol{\mu}_0) + \partial_{\mathcal{A}}^{(p)} \psi \right) \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p - \\
 & - \left\{ \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} (\boldsymbol{\mu}_0^p - \boldsymbol{\mu}_0) + \partial_{\mathcal{A}}^{(p)} \psi \right) r \odot \mathcal{A} \right\} \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p - \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} (\boldsymbol{\mu}_0^p - \boldsymbol{\mu}_0) - \partial_{\mathcal{A}}^{(p)} \psi \right) \cdot \nabla \tilde{\mathbf{I}}^p + \\
 & + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \mathbf{m}_0^d - \partial_{\nabla \rho^d} \psi \right) \cdot \nabla \delta \rho^d + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \operatorname{div} \mathbf{m}_0^d + B^d - \partial_{\rho^d} \psi \right) \cdot \delta \rho^d + \\
 & + \frac{1}{\hat{\rho}_0} (\nabla \rho^d \otimes \mathbf{m}_0^d) \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p \geq 0
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

care este satisfăcută pentru orice variație virtuală $\tilde{\mathbf{L}}, \nabla \tilde{\mathbf{L}}, \tilde{\mathbf{I}}^p, \nabla \tilde{\mathbf{I}}^p, \delta \rho^d, \nabla \delta \rho^d$, cu \mathbf{T}^* tensor simetric.

Teorema 1.2 1. *Restricțiile termomecanice impuse funcțiilor constitutive de tip elastic sunt:*

$$\frac{1}{\hat{\rho}} \boldsymbol{\pi} = 2 \partial_{\mathbf{C}^e} \psi_{\mathcal{K}}, \quad \{ \boldsymbol{\pi} \}^a = 0, \quad \frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{K}} = 0, \tag{1.20}$$

sau în mod echivalent

$$\frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T} = 2\mathbf{F}(\partial_{\mathbf{C}} \psi) \mathbf{F}^T, \quad \{ \mathbf{T} \}^a = 0, \tag{1.21}$$

sau

$$\frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T} = 2\mathbf{F}^e(\partial_{\mathbf{C}^e} \psi_{\mathcal{K}}) \mathbf{F}^{eT}, \quad \frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\mu}_0 = 0. \tag{1.22}$$

2. *Inegalitatea redusă a disipării capătă forma:*

$$\begin{aligned}
 & \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} (\boldsymbol{\Sigma}_0 - \boldsymbol{\Sigma}_0^p) + (\mathbf{F}^p)^T \partial_{\mathbf{F}^p} \psi \right) \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p + \{ \mathcal{A} \} \odot \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\mu}_0^p + \partial_{\mathcal{A}}^{(p)} \psi \right) \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p - \\
 & - \left\{ \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\mu}_0^p + \partial_{\mathcal{A}}^{(p)} \psi \right) r \odot \mathcal{A} \right\} \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\mu}_0^p + \partial_{\mathcal{A}}^{(p)} \psi \right) \cdot \nabla \tilde{\mathbf{I}}^p + \\
 & + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \mathbf{m}_0^d - \partial_{\nabla \rho^d} \psi \right) \cdot \nabla \delta \rho^d + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \operatorname{div} \mathbf{m}_0^d + B^d - \partial_{\rho^d} \psi \right) \cdot \delta \rho^d + \\
 & + \frac{1}{\hat{\rho}_0} (\nabla \rho^d \otimes \mathbf{m}_0^d) \cdot \tilde{\mathbf{I}}^p \geq 0.
 \end{aligned} \tag{1.23}$$

Având în vedere inegalitatea de disipare de mai sus, au fost formulate ipoteze constitutive în configurația de referință.

Ecuțiile de bilanț pentru micro-forțele asociate procesului de deformare plastică sunt scrise în configurația cu torsiune \mathcal{K} sub forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{\Upsilon}^p &= \operatorname{div}_{\mathcal{K}} (\boldsymbol{\mu}^p - \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{K}}) + \tilde{\rho} \mathbf{B}_m^p \\ \iff J^p \mathbf{\Upsilon}^p &= \operatorname{div} \{ (J^p (\boldsymbol{\mu}^p - \boldsymbol{\mu}_{\mathcal{K}})) (\mathbf{F}^p)^{-T} \} + \hat{\rho}_0 \mathbf{B}_m^p, \end{aligned} \quad (1.24)$$

pentru $J^p \tilde{\rho} = \hat{\rho}_0$. \mathbf{B}_m^p reprezintă densitatea masică a forțelor asociate mecanismului de deformare plastică. În cazul considerat aici macro-momentele $\boldsymbol{\mu}_{\mathcal{K}}$ se anulează.

Euațiile de bilanț pentru micro-forțele asociate densităților de dislocații sunt scrise în configurația cu torsiune \mathcal{K} sub forma

$$\begin{aligned} \Upsilon^d &= \operatorname{div}_{\mathcal{K}} \mathbf{m}^d + \tilde{\rho} B^d \\ \iff J^p \Upsilon^d &= \operatorname{div} \mathbf{m}_0^d + \hat{\rho}_0 B^d \end{aligned} \quad (1.25)$$

cu $\mathbf{m}_0^d = J^p (\mathbf{F}^p)^{-1} \mathbf{m}^d$, iar B^d este densitatea de forță masică.

Se consideră o reprezentare a densității de energie liberă de forma:

$$\psi := \psi(\mathbf{C}, \mathbf{F}^p, \overset{(p)}{\mathcal{A}}, \rho^d, \nabla \rho^d) \equiv \psi^e(\mathbf{E}^e) + \psi^{iv}(\mathbf{F}^p, \overset{(p)}{\mathcal{A}}) + \psi_T(\rho^d) + \psi^d(\nabla \rho^d), \quad (1.26)$$

în care $\mathbf{E}^e := \frac{1}{2}(\mathbf{C}^e - \mathbf{I})$. Precizăm expresiile pentru termenii din densitatea de energie:

$$\begin{aligned} \psi^d(\nabla \rho^d) &= \frac{1}{2} \kappa_2 \nabla \rho^d \cdot \nabla \rho^d, \kappa_2 > 0 \text{ și} \\ \psi^{iv}(\mathbf{F}^p, \overset{(p)}{\mathcal{A}}) &= \frac{1}{2} \kappa_3 (\operatorname{Skew} \overset{(p)}{\mathcal{A}}) \cdot (\operatorname{Skew} \overset{(p)}{\mathcal{A}}) \equiv \kappa_2 \boldsymbol{\alpha}_N \cdot \boldsymbol{\alpha}_N, \end{aligned} \quad (1.27)$$

în care tensorul de ordinul trei $\operatorname{Skew} \overset{(p)}{\mathcal{A}}$ este definit prin relația

$$((\operatorname{Skew} \overset{(p)}{\mathcal{A}}) \mathbf{u}) \mathbf{v} = (\overset{(p)}{\mathcal{A}} \mathbf{u}) \mathbf{v} - (\overset{(p)}{\mathcal{A}} \mathbf{v}) \mathbf{u} \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}, \quad (1.28)$$

iar tensorul de ordinul doi $\boldsymbol{\alpha}_N$, denumit (GND) sau densitatea de dislocație a lui Noll (Noll [1974]) este dat prin $\boldsymbol{\alpha}_N = (\mathbf{F}^p)^{-1} (\operatorname{curl} \mathbf{F}^p)$. Folosind definiția lui curl deducem $((\operatorname{Skew} \overset{(p)}{\mathcal{A}}) \mathbf{u}) \mathbf{v} = \boldsymbol{\alpha}_N (\mathbf{u} \otimes \mathbf{v}) \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$.

Ca o consecință directă deducem *setul complet de relații constitutive de tip energetic* asociate funcției densitate de energie liberă:

- Ecuția constitutivă de tip elastic dată prin

$$\frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T} = 2 \mathbf{F} (\partial_{\mathbf{C}} \psi^e) \mathbf{F}^T, \quad \text{unde} \quad \partial_{\mathbf{C}} \psi^e = (\mathbf{F}^p)^{-1} \partial_{\mathbf{C}^e} \psi^e (\mathbf{F}^p)^{-T}, \quad (1.29)$$

și consecința rezultată din (1.16) prin care ecuația constitutivă de tip elastic se reprezintă prin intermediul măsurii de tensiune a lui Mandel în raport cu configurația de referință

$$\Sigma_0 = 2\mathbf{C}(\partial_{\mathbf{C}}\psi^e), \text{ unde } \mathbf{C} = \mathbf{F}^T\mathbf{F}; \quad (1.30)$$

- Micro-momentul asociat mecanismului de deformare plastică, scris în raport cu configurația de referință, se exprimă printr-un tensor de ordinul al treilea, numit micro-momentul plastic $\boldsymbol{\mu}_0^p$, în funcție de densitatea energiei libere

$$\frac{1}{\hat{\rho}_0}\boldsymbol{\mu}_0^p = -\partial_{\underset{\mathcal{A}}{(\mathbf{p})}}\psi^{iv}; \quad (1.31)$$

- Măsura de tensiune de tip Mandel Σ_0^p și micro-momentul $\boldsymbol{\mu}_0^p$ sunt legate prin ecuația de bilanț

$$\frac{1}{\hat{\rho}_0}\Sigma_0^p = \frac{1}{\hat{\rho}_0}(\mathbf{F}^p)^T (\text{div} ((\mathbf{F}^p)^{-T}\boldsymbol{\mu}_0^p[\mathbf{I}, (\mathbf{F}^p)^T]) + \hat{\rho}_0\mathbf{B}_m^p)(\mathbf{F}^p)^{-T}, \quad (1.32)$$

unde \mathbf{B}_m^p este densitatea de masă a forțelor asociate mecanismului plastic de deformare.

Ecuația de evoluție pentru distorsiunea plastică \mathbf{F}^p în raport cu configurația de referință este dată de formula

$$\begin{aligned} \beta_1\mathbf{I}^p &= \frac{1}{\hat{\rho}_0}(\Sigma_0 - \Sigma_0^p) + (\mathbf{F}^p)^T\partial_{\mathbf{F}^p}\psi + \kappa_2(\nabla\rho^d \otimes \nabla\rho^d) \quad \text{în care} \\ \mathbf{I}^p &:= \frac{d}{dt}(\mathbf{F}^p)^{-1}\mathbf{F}^p \equiv -(\mathbf{F}^p)^{-1}\mathbf{L}^p. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Viteza de variație a densității de dislocație este caracterizată de o ecuație de evoluție nelocală sub forma:

$$\beta_2\frac{d}{dt}\rho^d = \frac{1}{\hat{\rho}_0}\text{div}(\hat{\rho}_0\kappa_2\nabla\rho^d) + B^d - \partial_{\rho^d}\psi. \quad (1.34)$$

Funcțiile scalare constitutive β_1 și β_2 sunt definite ca fiind compatibile cu inegalitatea de disipare redusă de tipul:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0}(\Sigma_0 - \Sigma_0^p) + (\mathbf{F}^p)^T\partial_{\mathbf{F}^p}\psi + \kappa_2(\nabla\rho^d \otimes \nabla\rho^d)\right) \cdot \mathbf{I}^p + \\ & + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0}\text{div}(\hat{\rho}_0\kappa_2\nabla\rho^d) + B^d - \partial_{\rho^d}\psi\right) \dot{\rho}^d \geq 0, \end{aligned} \quad (1.35)$$

în care micro-tensiunile Σ_0^p satisfac ecuația de bilanț (1.32).

Ca o consecință a formulelor (1.33) și (1.34) inegalitatea de disipare (1.35) se rescrie

$$\beta_1 \mathbf{P} \cdot \mathbf{P} + \beta_2 \left(\frac{d}{dt} \rho^d \right)^2 \geq 0.$$

În concluzie, prin eliminarea relațiilor constitutive de tip energetic se obțin următoarele reprezentări constitutive:

Problema 1.1 *Oricare ar fi istoria de deformare $t \rightarrow \mathbf{F}$, să se determine tensiunea Cauchy \mathbf{T} (sau tensorul de tensiune de tip Mandel Σ_0), distorsiunea plastică \mathbf{F}^p , densitatea de dislocație ρ^d , care satisfac, ca funcții de timp pentru o particulă materială fixată, următoarele relații:*

$$\frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T} = 2\mathbf{F}(\mathbf{F}^p)^{-1} (\partial_{\mathbf{C}^e} \psi^e) (\mathbf{F}^p)^{-T} \mathbf{F}^T \iff \frac{1}{\hat{\rho}_0} \Sigma_0 = 2\mathbf{C}(\mathbf{F}^p)^{-1} (\partial_{\mathbf{C}^e} \psi^e) (\mathbf{F}^p)^{-T} \quad (1.36)$$

$$-\beta_1 (\mathbf{F}^p)^{-1} \dot{\mathbf{F}}^p = \frac{1}{\hat{\rho}_0} \Sigma_0 - \frac{1}{\hat{\rho}} (\mathbf{F}^p)^T \left(\operatorname{div} \left((\mathbf{F}^p)^{-T} \boldsymbol{\mu}_0^p [\mathbf{I}, (\mathbf{F}^p)^T] \right) + \hat{\rho} \mathbf{B}_m^p \right) (\mathbf{F}^p)^{-T} + \quad (1.37)$$

$$+ (\mathbf{F}^p)^T \partial_{\mathbf{F}^p} \psi + \kappa_2 (\nabla \rho^d \otimes \nabla \rho^d) \quad \text{cu} \quad \boldsymbol{\mu}_0^p = -\hat{\rho}_0 \partial_{(\mathbf{p})} \psi^{iv}.$$

$$\beta_2 \frac{d}{dt} \rho^d = \frac{1}{\hat{\rho}_0} \operatorname{div} (\kappa_2 \hat{\rho}_0 \nabla \rho^d) + B^d - \partial_{\rho^d} \psi_T^d. \quad (1.38)$$

Funcțiile constitutive scalare β_1 și β_2 sunt astfel încât inegalitatea disipării (1.33), împreună cu (1.34), să fie satisfăcută sub forma

$$\beta_1 \left((\mathbf{F}^p)^{-1} \dot{\mathbf{F}}^p \right) \cdot \left((\mathbf{F}^p)^{-1} \dot{\mathbf{F}}^p \right) + \beta_2 (\dot{\rho}^d)^2 \geq 0.$$

Sistemul de alunecare α este definit prin vectorii unitari $\bar{\mathbf{s}}^\alpha$ și $\bar{\mathbf{m}}^\alpha$ în configurația intermediară (izoclină), unde $\bar{\mathbf{m}}^\alpha$ este normala la planul de alunecare, iar $\bar{\mathbf{s}}^\alpha$ este direcția de alunecare în plan. În configurația de referință, sistemului de alunecare i se asociază vectorii $\hat{\mathbf{s}}^\alpha$ și $\hat{\mathbf{m}}^\alpha$,

$$\mathbf{F}^p \hat{\mathbf{s}}^\alpha = \bar{\mathbf{s}}^\alpha, \quad (\mathbf{F}^p)^{-T} \hat{\mathbf{m}}^\alpha = \bar{\mathbf{m}}^\alpha \quad (1.39)$$

În configurația actuală sistemele de alunecare se deformează astfel:

$$\mathbf{F}^e \bar{\mathbf{s}}^\alpha = \mathbf{s}^\alpha, \quad (\mathbf{F}^e)^{-T} \bar{\mathbf{m}}^\alpha = \mathbf{m}^\alpha. \quad (1.40)$$

În ipoteza că viteza de variație a distorsiunii plastice este dată de o lege de curgere de tip Schmid, produsă prin mecanismul de alunecare în sistemele de alunecare, au loc formulele:

$$\dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha \bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{m}}^\alpha, \quad \iff \quad \mathbf{P} = \sum_{\alpha=1}^N \bar{\nu}^\alpha \mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha, \quad \bar{\nu}^\alpha := -\nu^\alpha, \quad (1.41)$$

unde ν^α este viteza de forfecare plastică. N este numărul sistemelor de alunecare, $\nu^\alpha = \dot{\gamma}^\alpha$ sunt vitezele de alunecare, iar γ^α reprezintă forfecările plastice în sistemele de alunecare α .

Teorema 1.3 *Puterea virtuala disipată de micro-forțe care satisfac ecuația de bilanț (1.24), în timpul procesului de deformare plastică cu viteza virtuală a distorsiunii plastice $\tilde{\mathbf{L}}^p$ conduce la reprezentarea ecuației de micro-bilanț în sistemul de alunecare α scrisă sub forma:*

$$\Pi^\alpha - \operatorname{div} \boldsymbol{\xi}^\alpha - \mu^\alpha = 0, \quad (1.42)$$

dacă pe frontiera elasto-plastică se anulează viteza distorsiunii plastice. Următoarele noi câmpuri sunt definite prin micro-forțe existente în mecanismul plastic și în mecanismul dislocațiilor:

$$\Pi^\alpha := \bar{\mathbf{s}}^\alpha \cdot \boldsymbol{\Upsilon}^p \bar{\mathbf{m}}^\alpha, \quad \mu^\alpha = \bar{\mathbf{s}}^\alpha \cdot \tilde{\rho} \mathbf{B}_m^p \bar{\mathbf{m}}^\alpha, \quad (1.43)$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\xi}^\alpha \cdot \mathbf{u} &:= \boldsymbol{\mu}^p (\mathbf{F}^p)^{-T} \mathbf{u} \cdot (\bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{m}}^\alpha) \iff \\ \iff \boldsymbol{\xi}^\alpha \cdot \mathbf{u} &:= \boldsymbol{\mu}_0^p \mathbf{u} \cdot (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha), \quad \forall \mathbf{u} \in \mathcal{V}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Teorema 1.4 *Inegalitatea de disipare (1.35) poate fi reprezentată sub forma*

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^N \bar{\nu}^\alpha \{ \tau^\alpha - \operatorname{div} \boldsymbol{\xi}^\alpha - \mu^\alpha + \mathbf{s}^\alpha \cdot ((\mathbf{F}^p)^T \partial_{\mathbf{F}^p} \psi) \mathbf{m}^\alpha - \\ - \kappa_2 (\mathbf{s}^\alpha \cdot \nabla \rho^d) (\mathbf{m}^\alpha \cdot \nabla \rho^d) \} + \left(\frac{1}{\hat{\rho}_0} \operatorname{div} (\hat{\rho}_0 \kappa_2 \nabla \rho^d \psi) + B^d - \partial_{\rho^d} \psi \right) \frac{d}{dt} \rho^d \geq 0, \end{aligned} \quad (1.45)$$

unde tensiunea redusă de forfecare a fost definită prin:

$$\tau^\alpha := \frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\Sigma}_0 \cdot (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) = (\mathbf{F}^e \bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes (\mathbf{F}^e)^{-T} \bar{\mathbf{m}}^\alpha) \cdot \frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T} \quad (1.46)$$

Vor fi introduse ecuațiile care descriu vitezele de forfecare plastică $\bar{\nu}^\alpha$ (numite și vitezele de alunecare) într-o manieră asemănătoare cu cea din plasticitatea materialelor cristaline.

- Fie tensiunea redusă efectivă de forfecare

$$\begin{aligned} \tau_{eff}^\alpha &:= \tau^\alpha - \Pi^\alpha + \mathbf{s}^\alpha \cdot ((\mathbf{F}^p)^T \partial_{\mathbf{F}^p} \psi) \mathbf{m}^\alpha - \\ &- \kappa_2 (\mathbf{s}^\alpha \cdot \nabla \rho^d) (\mathbf{m}^\alpha \cdot \nabla \rho^d), \end{aligned} \quad (1.47)$$

sau

$$\begin{aligned} \tau_{eff}^\alpha &:= \tau^\alpha - \operatorname{div} (\kappa_3 \mathbf{m}^\alpha \times (\boldsymbol{\alpha}_N)^T \mathbf{s}^\alpha) - \mu^\alpha \\ &+ \mathbf{s}^\alpha \cdot (\mathbf{F}^p)^T \partial_{\mathbf{F}^p} \psi \mathbf{m}^\alpha - \kappa_2 (\mathbf{s}^\alpha \cdot \nabla \rho^d) (\mathbf{m}^\alpha \cdot \nabla \rho^d), \\ \tau^\alpha &:= \frac{1}{\hat{\rho}_0} \boldsymbol{\Sigma}_0 \cdot (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) = (\mathbf{F}^e \bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes (\mathbf{F}^e)^{-T} \bar{\mathbf{m}}^\alpha) \cdot \frac{1}{\hat{\rho}} \mathbf{T} \end{aligned} \quad (1.48)$$

- Vom presupune existența *variabilelor de ecruisare*, ζ^α , care vor fi definite în cadrul constitutiv adoptat.
- Conform ipotezelor formulate mai sus, inegalitatea (1.45) împreună cu (1.48) devine

$$\sum_{\alpha=1}^N \bar{\nu}^\alpha \tau_{eff}^\alpha + \beta_2 \left| \frac{d}{dt} \rho^d \right|^2 \geq 0. \quad (1.49)$$

Forma finală a inegalității de disipare poate fi obținută ca o consecință a ecuației de evoluție a densității scalare de dislocație postulată prin (1.34).

- În cadrul constitutiv al elasto-plasticității, cu *legea de curgere pentru distorsiunea plastică* de tipul (1.41), vom introduce *funcția de plasticitate (sau de activare)*:

$$\mathcal{F}^\alpha(\mathbf{T}, \rho^d, \nabla \rho^d, \mathbf{s}^\alpha, \mathbf{m}^\alpha, \boldsymbol{\xi}^\alpha, \mu^\alpha, \zeta^\alpha) := |\tau_{eff}^\alpha| - \zeta^\alpha. \quad (1.50)$$

Aici, τ_{eff}^α este *tensiunea redusă efectivă de forfecare* definită prin (1.48), iar ζ^α - *variabilele de ecruisare* care măsoară rezistența la alunecare în sistemul de alunecare α .

- Sistemele de alunecare se activează dacă și numai dacă este satisfăcută *condiția de activare* $\mathcal{F}^\alpha(\mathbf{T}, \rho^d, \nabla \rho^d, \mathbf{s}^\alpha, \mathbf{m}^\alpha, \boldsymbol{\xi}^\alpha, \mu^\alpha, \zeta^\alpha) \geq 0$.
- Vom introduce acum ecuația de evoluție corespunzătoare, numită **legea vâscoplastică de curgere**, care caracterizează variația în timp a forfecării plastice.

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau_{eff}^\alpha}{\zeta^\alpha} \right|^n \operatorname{sgn}(\tau_{eff}^\alpha) H(\mathcal{F}^\alpha), \forall \alpha = 1, \dots, N, \quad (1.51)$$

unde $\bar{\nu}^\alpha \equiv \dot{\gamma}^\alpha$. Aici, H reprezintă funcția Heaviside compusă cu funcția de activare \mathcal{F}^α . Funcția Heaviside este: $H(x) = 1$ dacă $x \geq 0$ și $H(x) = 0$ dacă $x < 0$. A fost introdusă o expresie similară cu cea postulată de Teodosiu și Sidoroff [1976].

Propoziția 1.2 *Inegalitatea de disipare (1.49) este realizabilă dacă se ține cont de ecuațiile de evoluție pentru forfecările plastice (1.51) și de $\beta_2 \geq 0$.*

Demonstrație. Pentru ca inegalitatea de disipare să aibă loc, presupunem că pe parcursul procesului elasto-plastic la un anumit moment de timp t au loc:

1. Dacă $|\tau_{eff}^\alpha| < \zeta^\alpha$, atunci $\bar{\nu}^\alpha = 0$ și (1.49) devine:

$$\beta_2 \left| \frac{d}{dt} \rho^d \right|^2 \geq 0.$$

2. Dacă $|\tau_{eff}^\alpha| \geq \zeta^\alpha$, atunci $H(\mathcal{F}^\alpha) = 1$ și inegalitatea redusă este

$$\sum_{\alpha=1}^N |\bar{\nu}^\alpha| |\tau_{eff}^\alpha| + \beta_2 \left| \frac{d}{dt} \rho^d \right|^2 \geq 0. \quad (1.52)$$

CAPITOLUL 2

Formularia variațională în vâscoplasticitatea materialelor cristaline

Rezultatele ale acestui capitol sunt prezentate având la bază articolele Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013, trimis spre publicare] și Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013a].

Pornind de la modelul constitutiv prezentat în Cap. 1, propunem un model care este dependent de dislocații, în care viteza distorsiunii plastice este descrisă prin legea de curgere de tip Schmid. Se ține cont de condiția de activare a sistemelor de alunecare, iar ecuațiile de evoluție pentru densitățile de dislocație sunt descrise de ecuații nelocale de tipul (1.34). Ecuații de tip diferențial pentru densitățile de dislocație derivă din ecuațiile nelocale (1.34), dacă se consideră $\kappa_2 = 0$. Forma potențialului de energie ψ_T poate fi determinată, dacă se identifică ecuațiile nelocale cu unele locale. De asemenea, în modelul propus, s-a ținut cont de contra-tensiune, numită în literatură ”backstress”, ca variabilă internă conform Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013b].

Se formulează egalitatea variațională și sistemul de tip diferențial asociat modelului vâscoplastic. Vom utiliza formularia de tip incremental, la momentul t , a ecuației de echilibru în configurația actuală. În acest capitol am introdus o teoremă de caracterizare a stării plane de tensiune în cadrul constitutiv al vâsco-plasticității materialelor cristaline cu structură (FCC).

Ecuația constitutivă de tip elastic în raport cu configurația relaxată este descrisă prin potențialul φ în modul următor:

$$\boldsymbol{\pi} = \tilde{\rho} \frac{\partial \varphi(\mathbf{E}^e)}{\partial \mathbf{E}^e}, \quad \mathbf{E}^e = \frac{1}{2} \left((\mathbf{F}^e)^T \mathbf{F}^e - \mathbf{I} \right). \quad (2.1)$$

Utilizând relația de legătură dintre tensorul de tensiune Cauchy și tensorul simetric de tensiune Piola-Kirchhoff în raport cu configurația relaxată (sau deformată plastic)

$$\mathbf{T} = \frac{1}{\det \mathbf{F}^e} \mathbf{F}^e \boldsymbol{\pi} (\mathbf{F}^e)^T \quad \text{cu} \quad \hat{\rho} \det \mathbf{F}^e = \tilde{\rho}, \quad (2.2)$$

ecuația constitutivă de tip elastic poate fi scrisă sub forma:

$$\mathbf{T} = \hat{\rho} \mathbf{F}^e \frac{\partial \varphi(\mathbf{E}^e)}{\partial \mathbf{E}^e} (\mathbf{F}^e)^T. \quad (2.3)$$

Relațiile (2.1) și (2.3) mai pot fi scrise prin tensorii de ordinul patru \mathcal{C} și \mathcal{E} astfel:

$$\frac{\boldsymbol{\pi}}{\tilde{\rho}} = \mathcal{C}[\mathbf{E}^e] \quad \text{cu} \quad \mathbf{E}^e = \frac{1}{2} \left((\mathbf{F}^e)^T \mathbf{F}^e - \mathbf{I} \right), \quad (2.4)$$

și, respectiv,

$$\frac{\mathbf{T}}{\tilde{\rho}} = \mathcal{E}[\mathbf{b}^e] \quad \text{cu} \quad \mathbf{b}^e = \frac{1}{2} \left(\mathbf{I} - (\mathbf{F}^e)^{-T} (\mathbf{F}^e)^{-1} \right). \quad (2.5)$$

Aici, \mathcal{E} caracterizează tensorul de ordinul patru al complianțelor elastice în configurația actuală și se obține din tensorul de ordinul patru al coeficienților elastici de material \mathcal{C} dată în raport cu configurația izoclină prin procedeul de transformare de la o configurație la alta, adică:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\mathbf{X}] &= \mathbf{F}^e \mathcal{C} \left[(\mathbf{F}^e)^T \mathbf{X} \mathbf{F}^e \right] (\mathbf{F}^e)^T, \quad \forall \mathbf{X} \text{ tensor simetric} \\ \mathcal{E}_{ijkl} &= F_{im}^e F_{jn}^e F_{ks}^e F_{lr}^e \mathcal{C}_{mnsr}, \quad \text{în reprezentare pe componente.} \end{aligned} \quad (2.6)$$

Pe de altă parte, tensorul elastic de ordinul patru \mathcal{E} depinde de distorsiunea elastică prin intermediul potențialului φ astfel

$$\mathcal{E}[\mathbf{X}] = \mathbf{F}^e \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial (\mathbf{E}^e)^2} \left[(\mathbf{F}^e)^T \mathbf{X} \mathbf{F}^e \right] \right) (\mathbf{F}^e)^T, \quad \forall \mathbf{X} \in Sym. \quad (2.7)$$

În modelul propus, evoluția în timp a distorsiunii plastice este descrisă de alunecarea atomilor în sisteme de alunecare, printr-o lege de tip Schmid, prin relația

$$\dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha (\bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{m}}^\alpha), \quad (2.8)$$

unde ν^α sunt vitezele de forfecare plastică în sistemul de alunecare α . Inițial sistemul de alunecare este dat în configurația izoclină, unde $\bar{\mathbf{m}}^\alpha$ reprezintă normala la sistemul de alunecare, iar $\bar{\mathbf{s}}^\alpha$ este direcția de alunecare, și în timp ele se deformează datorită prezenței distorsiunii elastice \mathbf{F}^e . În configurația actuală, sistemul de alunecare $(\bar{\mathbf{m}}^\alpha, \bar{\mathbf{s}}^\alpha)$ este definit prin relațiile:

$$\mathbf{F}^e \bar{\mathbf{s}}^\alpha = \mathbf{s}^\alpha, \quad (\mathbf{F}^e)^{-T} \bar{\mathbf{m}}^\alpha = \mathbf{m}^\alpha. \quad (2.9)$$

În mod evident, are loc condiția de ortogonalitate $\mathbf{s}^\alpha \cdot \mathbf{m}^\alpha = 0$.

Prin derivarea temporală a relației de descompunere multiplicativă a gradientului de deformare se obține variația în raport cu timpul a distorsiunii elastice în raport cu configurația inițială prin gradientul vitezei $\mathbf{L} = \nabla \mathbf{v}$, unde \mathbf{v} definește viteza spațială

$$\dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1} = \mathbf{L} - \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha), \quad \mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} (\mathbf{F})^{-1}. \quad (2.10)$$

Modelul va fi puternic legat de prezența dislocațiilor în interiorul corpului și de acumularea și mișcarea lor. În model se utilizează următoarele variabile interne: densitățile de dislocație ρ^α și variabilele de ecruisare ζ^α în sistemul de alunecare α .

Condiția de activare este formulată prin legea lui Schmid

$$|\tau^\alpha - \tau_b^\alpha| \geq \zeta^\alpha \iff \mathcal{F}^\alpha \geq 0 \quad \text{unde} \quad \mathcal{F}^\alpha := |\tau^\alpha - \tau_b^\alpha| - \zeta^\alpha, \quad (2.11)$$

cu

$$\tau^\alpha = \boldsymbol{\tau} \mathbf{m}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\alpha. \quad (2.12)$$

În această formulă τ^α reprezintă *tensiunea de forfecare redusă în sistemul de alunecare α* sau *tensiunea de forfecare rezultantă*, τ_b^α este contra-tensiunea în sistemul de alunecare α și

$$\boldsymbol{\tau} = J \mathbf{T}, \quad \text{unde} \quad J = \det \mathbf{F} \equiv \frac{\hat{\rho}_0}{\hat{\rho}}. \quad (2.13)$$

Legea de curgere vâscoplastică asociată cu procesul de deformare este dată sub forma:

$$\nu^\alpha = \dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0^\alpha \left| \frac{\tau^\alpha - \tau_b^\alpha}{\zeta^\alpha} \right|^n \text{sign}(\tau^\alpha - \tau_b^\alpha) \mathcal{H}(\mathcal{F}^\alpha), \quad \forall \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.14)$$

introdusă de Teodosiu și Sidoroff [1976] în cazul în care contra-tensiunea nu a fost considerată.

Legea de ecruisare este descrisă fie printr-o funcție dependentă de densitățile de dislocație, de exemplu, $\zeta^\alpha = \mu b \left(\sum_{\beta} a^{\alpha\beta} \rho^\beta \right)^{1/2}$, vezi Teodosiu și Sidoroff [1976],

unde μ este modulul de forfecare elastică, b este mărimea vectorului Burgers și $(a^{\alpha\beta})$ este matricea de ecruisare care descrie diferite tipuri de interacțiuni ale dislocațiilor, fie printr-o lege de evoluție, ca în plasticitatea materialelor cristaline, fie prin vitezele de forfecare plastică, vezi Teodosiu et al. [1993]

$$\dot{\zeta}^\alpha = \sum_{\beta=1}^N h^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^\beta|. \quad (2.15)$$

Aici, $h^{\alpha\beta} = h^{\alpha\beta}(\rho^q)$ sunt componentele matricei de ecrisare și ele depind de densitatea de dislocație. Mai mult, această matrice a fost reprezentată de Teodosiu et al. [1993], astfel:

$$h^{\alpha\beta} = \frac{\mu}{2} a^{\alpha\beta} \left(\sum_q a^{\alpha q} \rho^q \right)^{-1/2} \left\{ \frac{1}{K} \left(\sum_{q \neq \alpha} \rho^q \right)^{1/2} - 2y_c \rho^\beta \right\}, \quad (2.16)$$

unde K este un parametru de material și y_c reprezintă lungimea caracteristică legată de procesul de anihilare a dipolilor de dislocație.

În lucrarea de față, ecuația de evoluție a densităților de dislocație este descrisă fie printr-o ecuație diferențială I, fie printr-o ecuație nelocală II.

I. Considerăm ecuația de evoluție locală, de exemplu așa cum este dată în Teodosiu et al. [1993]:

$$\dot{\rho}^\alpha = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^\alpha} - 2y_c \rho^\alpha \right) |\nu^\alpha| \quad \text{cu} \quad L^\alpha = K \left(\sum_{q \neq \alpha} \rho^q \right)^{-1/2}. \quad (2.17)$$

II. Considerăm o ecuație de evoluție nelocală, de tip difuzie, așa cum este reprezentată în Bortoloni și Cermelli [2004], aceasta fiind o ecuație neliniară de tip parabolic

$$\dot{\rho}^\alpha = D \left(k \Delta \rho^\alpha - \frac{\partial \psi_T}{\partial \rho^\alpha} \right) |\nu^\alpha|, \quad \alpha = 1, \dots, N, \quad (2.18)$$

unde D și k sunt constante de material. Aici, ψ_T reprezintă energia de defect.

Observația 2.1 *Putem deduce forma potențialului ψ_T dacă egalăm expresiile din membrul drept al relațiilor (2.17) și (2.18) în cazul $k = 0$.*

Condiția pe frontieră a ecuației (2.18) este considerată de tipul:

$$k \frac{\partial \rho^\alpha}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \nabla (k \rho^\alpha) = i^\alpha(\rho^\beta), \quad (2.19)$$

și aceasta poate fi interpretată ca o condiție de impenetrabilitate a dislocațiilor pe frontiera domeniului. Se consideră descrierea relativă a mișcării $\chi : \mathcal{B} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{E}$ în raport cu configurația de la momentul t , considerat fixat, în timp ce momentul curent de timp va fi τ .

Se definesc:

- $\mathbf{x} = \chi(\mathbf{X}, t)$, - poziția particulei \mathbf{X} la momentul de timp t ;
- $\mathbf{y} = \chi(\mathbf{X}, \tau) = \chi(\chi^{-1}(\mathbf{x}, t), \tau) := \chi_t(\mathbf{x}, \tau)$ - poziția particulei \mathbf{X} la momentul de timp τ ;

- $\mathbf{F}(\mathbf{X}, \tau) = \nabla_{\mathbf{X}}\chi(\mathbf{X}, \tau)$ - gradientul de deformație la momentul de timp τ ;
- $\mathbf{F}(\mathbf{X}, t) = \nabla_{\mathbf{X}}\chi(\mathbf{X}, t)$ - gradientul de deformație la momentul de timp t ;
- $\mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \tau) = \nabla_{\mathbf{x}}\chi_t(\mathbf{x}, \tau)$ - gradientul relativ la momentul de timp τ ;
- $\mathbf{v}(\mathbf{y}, \tau) := \partial_{\tau}\chi_t(\mathbf{x}, \tau)$ - viteza în configurația curentă la momentul de timp τ ;
- $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \partial_{\tau}\chi_t(\mathbf{x}, \tau)|_{\tau=t}$ - viteza în configurația de la momentul de timp t ;
- $\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau) = (\det\mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \tau)) \mathbf{T}(\mathbf{y}, \tau) (\mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \tau))^{-T}$ - tensorul relativ nesimetric Piola - Kirchhoff; unde $\mathbf{T}(\mathbf{y}, \tau)$ reprezintă tensorul de tensiune Cauchy în configurația actuală;

- $\det\mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \tau) = \frac{\hat{\rho}(\mathbf{x}, t)}{\hat{\rho}(\mathbf{y}, \tau)}$ - determinantul gradientului relativ.

Propoziția 2.1 (1) Gradientul relativ \mathbf{F}_t se exprimă astfel:

$$\mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \tau) = \mathbf{F}(\mathbf{X}, \tau) (\mathbf{F}(\mathbf{X}, t))^{-1}, \quad \mathbf{F}_t(\mathbf{X}, t) = \mathbf{I}. \quad (2.20)$$

(2) La momentul de timp t , tensiunea nominală satisface următoarele relații:

$$\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, t) = \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \xi_i \quad (2.21)$$

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}_t(\mathbf{x}, t) &\equiv \frac{d}{d\tau}\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau)|_{\tau=t} = \frac{\partial}{\partial\tau}\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau)|_{\tau=t} \\ &= \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{T}(\mathbf{x}, t)}{\hat{\rho}(\mathbf{x}, t)} \right) - \mathbf{T}(\mathbf{x}, t) \mathbf{L}^T(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (2.22)$$

(3) Forța de contact (de suprafață) ce acționează pe suprafața $\mathcal{P}(\tau)$, reprezentând poziția părții $\mathcal{P} \subset \mathcal{B}$ la momentul de timp τ , se exprimă în raport cu tensiunea nominală $\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau)$:

$$\mathbf{f}_c(\mathcal{P}, \tau) = \int_{\partial\mathcal{P}(\tau)} \mathbf{T}(\mathbf{y}, \tau) \mathbf{n}(\mathbf{y}, \tau) da = \int_{\partial\mathcal{P}(t)} \mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) dA, \quad (2.23)$$

unde $\mathbf{n}(\mathbf{x})$ este normala exterioară la suprafața domeniului.

Se consideră în continuare forme echivalente ale ecuației de echilibru:

$$\operatorname{div}_{\mathbf{x}}\mathbf{T}(\mathbf{x}, t) + \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) \mathbf{b}(\mathbf{x}, t) = 0 \quad \text{în } \Omega_t, \quad (2.24)$$

$$\operatorname{div}_{\mathbf{y}}\mathbf{T}(\mathbf{y}, \tau) + \hat{\rho}(\mathbf{y}, \tau) \mathbf{b}(\mathbf{y}, \tau) = 0 \quad \text{în } \Omega_{\tau}, \quad (2.25)$$

$$\operatorname{div}_{\mathbf{x}}\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau) + \hat{\rho}(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{b}_t(\mathbf{x}, \tau) = 0, \quad (2.26)$$

$$\text{cu } \mathbf{b}_t(\mathbf{x}, \tau) = \mathbf{b}(\chi_t(\mathbf{x}, \tau), \tau).$$

cu $\mathbf{T}(\mathbf{x}, t), \mathbf{T}(\mathbf{y}, \tau) \in \text{Sym}$, iar \mathbf{b} este forța masică. Tensorul de tensiune Piola - Kirchhoff \mathbf{S}_t satisface, în plus, relația de simetrie:

$$\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{F}_t^T(\mathbf{x}, \tau) = \mathbf{F}_t(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{S}_t^T(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.27)$$

Atașăm ecuației (2.26) condițiile pe frontiera Ω_t , considerată configurație de referință:

$$\mathbf{S}_t(\mathbf{x}, \tau) \mathbf{n}(\mathbf{x}, \tau) |_{\Gamma_{1t}} = \mathbf{s}_t^*(\mathbf{x}, \tau), \quad (\chi_t(\mathbf{x}, \tau) - \mathbf{x}) |_{\Gamma_{2t}} = \mathbf{u}_t^*(\mathbf{x}, \tau). \quad (2.28)$$

Aici, $\partial\Omega_t \equiv \Gamma_{1t} \cup \Gamma_{2t}$ reprezintă frontiera domeniului tridimensional Ω_t , $\mathbf{n}(\mathbf{x}, \tau)$ - normala unitară la suprafața Γ_{1t} , în timp ce $\chi_t(\mathbf{x}, \tau) - \mathbf{x}$ este vectorul deplasare în raport cu configurația de la momentul t . \mathbf{s}_t^* și \mathbf{u}_t^* sunt încărcarea exterioară, respectiv vectorul deplasare ca funcții date de timpul τ , în raport cu configurația fixată la momentul t .

Problema quasi-statică incrementală la momentul de timp t se obține, dacă se derivează în raport cu τ ecuația de echilibru (2.26) și condițiile la frontieră (2.28), iar derivatele sunt calculate la momentul de timp $\tau = t$:

$$\operatorname{div} \dot{\mathbf{S}}_t(\mathbf{x}, t) + \hat{\rho}(\mathbf{x}, t) \dot{\mathbf{b}}_t(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (2.29)$$

$$\dot{\mathbf{S}}_t(\mathbf{x}, t) \mathbf{n}(\mathbf{x}, t) |_{\Gamma_{1t}} = \dot{\mathbf{s}}_t^*(\mathbf{x}, t), \quad (2.30)$$

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) |_{\Gamma_{2t}} = \dot{\mathbf{u}}_t^*(\mathbf{x}, t). \quad (2.31)$$

unde $\dot{\mathbf{b}}_t(\mathbf{x}, t) \equiv \frac{\partial}{\partial \tau} \mathbf{b}_t(\mathbf{x}, t) |_{\tau=t}$.

Teorema 2.1 Fie o istorie dată a gradientului de deformație $t \in [t_0, t'] \rightarrow \mathbf{F}(t)$. Sistemul diferențial care descrie evoluția necunoscutelor $\mathbf{T}/\hat{\rho}$, \mathbf{F}^e , \mathbf{s}^α , \mathbf{m}^α , ζ^α , ρ^α este dat de:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} \right) &= \mathbf{L} \frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} - \frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} \mathbf{L}^T = \\ &= \mathcal{E}[\mathbf{D}] - \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha \mathcal{E} \left[\{\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha\}^S \right] - \\ &= \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) \frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} - \frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha)^T \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1} = \mathbf{L} - \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) \quad (2.33)$$

$$\dot{\mathbf{s}}^\alpha = \mathbf{L} \mathbf{s}^\alpha - \sum_{\beta=1}^N \nu^\beta (\mathbf{s}^\beta \otimes \mathbf{m}^\beta) \mathbf{s}^\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.34)$$

$$\dot{\mathbf{m}}^\alpha = -\mathbf{L}^T \mathbf{m}^\alpha + \sum_{\beta=1}^N \nu^\beta (\mathbf{m}^\beta \otimes \mathbf{s}^\beta) \mathbf{m}^\alpha, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.35)$$

$$\dot{\zeta}^\alpha = \sum_{\beta=1}^N h^{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{\beta}| \quad (2.36)$$

unde

$$\dot{\rho}^\alpha = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^\alpha} - 2y_c \rho^\alpha \right) |\nu^\alpha|, \quad (2.37)$$

$$L^\alpha = K \left(\sum_{q \neq \alpha} \rho^q \right)^{-1/2}, \quad \alpha = 1, \dots, N$$

sau

$$\dot{\rho}^\alpha = D |\nu^\alpha| \left(k \Delta \rho^\alpha - \frac{\partial \psi_T}{\partial \rho^\alpha} \right), \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.38)$$

cu

$$\nu^\alpha = \nu_0^\alpha \left| \frac{J \mathbf{T} \mathbf{m}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\alpha - \tau_b^\alpha}{\zeta^\alpha} \right|^n \text{sign} (J \mathbf{T} \mathbf{m}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\alpha - \tau_b^\alpha) \mathcal{H}(\mathcal{F}^\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.39)$$

iar \mathcal{H} reprezintă funcția Heaviside.

Derivata temporală a tensiunii nominale se exprimă prin

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}_t(\mathbf{x}, t) = & \mathbf{L} \mathbf{T} + \hat{\rho} \mathcal{E}[\mathbf{D}] - \\ & - \hat{\rho} \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha \left\{ \mathcal{E} \left[\{\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha\}^S \right] + (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) \frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} + \frac{\mathbf{T}}{\hat{\rho}} (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha)^T \right\} \end{aligned} \quad (2.40)$$

Ecuția de echilibru pentru problema la limită cu condiții de tip (2.30) și (2.31) a fost formulată în raport cu viteza tensiunii nominale (2.29). Forma slabă a acestei ecuații este:

$$\int_{\Omega_t} \dot{\mathbf{S}}_t \cdot \nabla \mathbf{w} d\mathbf{x} = \int_{\partial \Omega_t} \dot{\mathbf{S}}_t \mathbf{n} \cdot \mathbf{w} da + \int_{\Omega_t} \hat{\rho} \dot{\mathbf{b}}_t \cdot \mathbf{w} d\mathbf{x}. \quad (2.41)$$

Teorema 2.2 Fie starea curentă a corpului cunoscută la momentul de timp t , adică sunt date: tensiunea Cauchy \mathbf{T} , densitatea de masă $\hat{\rho}$, poziția sistemului de alunecare $(\mathbf{m}^\alpha, \mathbf{s}^\alpha)$, densitățile de dislocație ρ^α , variabilele de ecrisare ζ^α . Atunci problema cu condiții pe frontieră de tip (2.30) și (2.31) conduce la următoarea egalitate variațională, în care necunoscuta este câmpul vitezei $\mathbf{v} \in \mathcal{S}$:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_t} (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{T} \cdot \nabla \mathbf{w} d\mathbf{x} + \int_{\Omega_t} \hat{\rho} \mathcal{E}[\mathbf{D}] \cdot \nabla \mathbf{w} d\mathbf{x} - \\ & - \sum_{\alpha=1}^N \int_{\Omega_t} \nu^\alpha \left\{ \hat{\rho} \mathcal{E} \left[\{\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha\}^S \right] + (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha) \mathbf{T} + \mathbf{T} (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha)^T \right\} \cdot \nabla \mathbf{w} d\mathbf{x} = \\ & = \int_{\Gamma_{1t}} \dot{\mathbf{S}}_t \cdot \mathbf{w} da + \int_{\Omega_t} \hat{\rho} \dot{\mathbf{b}}_t \cdot \mathbf{w} d\mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{V}, \end{aligned} \quad (2.42)$$

cu

$$\nu^\alpha = \nu_0^\alpha \left| \frac{J \mathbf{T} \mathbf{m}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\alpha - \tau_b^\alpha}{\zeta^\alpha} \right|^n \text{sign} (J \mathbf{T} \mathbf{m}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\alpha - \tau_b^\alpha) \mathcal{H}(\mathcal{F}^\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (2.43)$$

iar mulțimea soluțiilor test și mulțimea funcțiilor pondere sunt de forma:

$$\mathcal{S} = \left\{ \mathbf{v} \in (H^1)^3 \mid \mathbf{v} = \mathbf{v}_t^*, \mathbf{x} \in \Gamma_{2t} \right\}, \mathcal{V} = \left\{ \mathbf{w} \in (H^1)^3 \mid \mathbf{w} = 0, \mathbf{x} \in \Gamma_{2t} \right\}.$$

Vom considera, în continuare, sisteme de alunecare cristalografică (FCC), pentru care direcțiile de alunecare și normalele la planele de alunecare sunt date în Tabelul 2.1.

Tabelul 2.1: Direcțiile de alunecare $\bar{\mathbf{s}}^\alpha$ și normalele la planele de alunecare $\bar{\mathbf{m}}^\alpha$ în cazul (FCC)

$\bar{\mathbf{s}}^1 = \frac{1}{\sqrt{2}} [1, \bar{1}, 0]$	$\bar{\mathbf{m}}^1 = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, 1, 1)$	$\bar{\mathbf{s}}^7 = \frac{1}{\sqrt{2}} [1, \bar{1}, 0]$	$\bar{\mathbf{m}}^7 = \frac{1}{\sqrt{3}} (\bar{1}, \bar{1}, 1)$
$\bar{\mathbf{s}}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{1}, 0, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^2 = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, 1, 1)$	$\bar{\mathbf{s}}^8 = \frac{1}{\sqrt{2}} [\bar{1}, 0, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^8 = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, \bar{1}, 1)$
$\bar{\mathbf{s}}^3 = \frac{1}{\sqrt{2}} [0, \bar{1}, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^3 = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, 1, 1)$	$\bar{\mathbf{s}}^9 = \frac{1}{\sqrt{2}} [0, \bar{1}, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^9 = \frac{1}{\sqrt{3}} (\bar{1}, 1, 1)$
$\bar{\mathbf{s}}^4 = \frac{1}{\sqrt{2}} [1, 0, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^4 = \frac{1}{\sqrt{3}} (\bar{1}, \bar{1}, 1)$	$\bar{\mathbf{s}}^{10} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1, 0, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^{10} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\bar{1}, 1, 1)$
$\bar{\mathbf{s}}^5 = \frac{1}{\sqrt{2}} [0, 1, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^5 = \frac{1}{\sqrt{3}} (\bar{1}, \bar{1}, 1)$	$\bar{\mathbf{s}}^{11} = \frac{1}{\sqrt{2}} [0, 1, 1]$	$\bar{\mathbf{m}}^{11} = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, \bar{1}, 1)$
$\bar{\mathbf{s}}^6 = \frac{1}{\sqrt{2}} [1, 1, 0]$	$\bar{\mathbf{m}}^6 = \frac{1}{\sqrt{3}} (1, \bar{1}, 1)$	$\bar{\mathbf{s}}^{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} [1, 1, 0]$	$\bar{\mathbf{m}}^{12} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\bar{1}, 1, 1)$

Vom introduce, cu scopul de a simplifica scrierea, următoarele mărimi: $\mathbf{G} = \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha \mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha$ și $\bar{\mathbf{G}} = \sum_{\alpha=1}^N \nu^\alpha \bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{m}}^\alpha$. Este evident că $\mathbf{G} = \mathbf{F}^e \bar{\mathbf{G}} (\mathbf{F}^e)^{-1}$. Deducem în continuare condițiile necesare pentru ca starea plană de tensiune să fie satisfăcută

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & 0 \\ T_{12} & T_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.44)$$

iar gradientul de deformare $\mathbf{F} = \mathbf{I} + \nabla \mathbf{u}$, să descrie o așa numită stare plană de deformare generalizată

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & 0 \\ F_{21} & F_{22} & 0 \\ 0 & 0 & F_{33} \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Contra-tensiunea τ_b^α este considerată nulă. Distingem 6 grupuri de sisteme de alunecare, care se pot activa simultan

$$\tau^1 + \tau^7 = 0, \tau^2 = \tau^4, \tau^3 = \tau^5, \tau^6 + \tau^{12} = 0, \tau^8 = \tau^{10}, \tau^9 = \tau^{11}. \quad (2.46)$$

Deoarece vitezele de forfecare plastică sunt date de formula

$$\nu^\alpha = \nu_0^\alpha \left| \frac{\tau^\alpha}{\zeta^\alpha} \right|^n \text{sign}(\tau^\alpha) \mathcal{H}(|\tau^\alpha| - \zeta^\alpha), \quad (2.47)$$

putem trage concluzia că

$$\nu^1 = -\nu^7, \nu^6 = -\nu^{12}, \nu^2 = \nu^4, \nu^3 = \nu^5, \nu^8 = \nu^{10}, \nu^9 = \nu^{11}. \quad (2.48)$$

Conform acestor rezultate, ecuația de evoluție pentru distorsiunea plastică devine

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} &= \nu^1 (\bar{\mathbf{s}}^1 \otimes \bar{\mathbf{m}}^1 - \bar{\mathbf{s}}^7 \otimes \bar{\mathbf{m}}^7) + \nu^2 (\bar{\mathbf{s}}^2 \otimes \bar{\mathbf{m}}^2 + \bar{\mathbf{s}}^4 \otimes \bar{\mathbf{m}}^4) \\ &+ \nu^3 (\bar{\mathbf{s}}^3 \otimes \bar{\mathbf{m}}^3 + \bar{\mathbf{s}}^5 \otimes \bar{\mathbf{m}}^5) + \nu^6 (\bar{\mathbf{s}}^6 \otimes \bar{\mathbf{m}}^6 - \bar{\mathbf{s}}^{12} \otimes \bar{\mathbf{m}}^{12}) \\ &+ \nu^8 (\bar{\mathbf{s}}^8 \otimes \bar{\mathbf{m}}^8 + \bar{\mathbf{s}}^{10} \otimes \bar{\mathbf{m}}^{10}) + \nu^9 (\bar{\mathbf{s}}^9 \otimes \bar{\mathbf{m}}^9 + \bar{\mathbf{s}}^{11} \otimes \bar{\mathbf{m}}^{11}). \end{aligned} \quad (2.49)$$

În consecință, expresia vitezei distorsiunii plastice sub forma matriceală este:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} &= \\ &= \frac{2}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \nu^1 - \nu^2 + \nu^6 - \nu^8 & \nu^1 - \nu^2 - \nu^6 + \nu^8 & 0 \\ -\nu^1 - \nu^3 + \nu^6 + \nu^9 & -\nu^1 - \nu^3 - \nu^6 - \nu^9 & 0 \\ 0 & 0 & \nu^2 + \nu^3 + \nu^8 + \nu^9 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.50)$$

Propoziția 2.2 *Dacă \mathbf{F} și \mathbf{F}^e caracterizează o stare de deformare generalizată*

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & 0 \\ F_{21} & F_{22} & 0 \\ 0 & 0 & F_{33} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}^e = \begin{pmatrix} F_{11}^e & F_{12}^e & 0 \\ F_{21}^e & F_{22}^e & 0 \\ 0 & 0 & F_{33}^e \end{pmatrix}, \quad (2.51)$$

atunci au loc următoarele consecințe:

(i) *Tensorul elastic de ordinul patru în configurația actuală (2.6) este caracterizat (dacă se folosește notația standard) de următoarea matrice simetrică:*

$$(\bar{\mathcal{E}})_{i,j=\overline{1,6}} = \begin{bmatrix} \bar{\mathcal{E}}_{11} & \bar{\mathcal{E}}_{12} & \bar{\mathcal{E}}_{13} & \bar{\mathcal{E}}_{14} & 0 & 0 \\ & \bar{\mathcal{E}}_{22} & \bar{\mathcal{E}}_{23} & \bar{\mathcal{E}}_{24} & 0 & 0 \\ & & \bar{\mathcal{E}}_{33} & \bar{\mathcal{E}}_{34} & 0 & 0 \\ & & & \bar{\mathcal{E}}_{44} & 0 & 0 \\ & & & & \bar{\mathcal{E}}_{55} & \bar{\mathcal{E}}_{56} \\ & & & & & \bar{\mathcal{E}}_{66} \end{bmatrix}, \quad (2.52)$$

Expresiile pentru $\bar{\mathcal{E}}_{ij}$ sunt date în Anexa B.

(ii) *Componentele $\bar{G}_{13}, \bar{G}_{31}, \bar{G}_{23}$ și \bar{G}_{32} ale vitezei distorsiunii plastice $\bar{\mathbf{G}} = (\dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1})$ se anulează;*

(iii) Componentele $T_{13} = T_{23} = 0$, ținând cont că ele sunt zero la momentul inițial de timp;

(iv) Derivata în raport cu timpul a componentei T_{33} se exprimă prin:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{T_{33}}{\hat{\rho}} \right) = 2(L_{33} - G_{33}) \frac{T_{33}}{\hat{\rho}} + \mathcal{E}_{33kl} D_{kl} - \mathcal{E}_{33kl} G_{kl}^S. \quad (2.53)$$

Putem formula următorul rezultat de bază ce decurge din Propoziția 2.2.

Teorema 2.3 Presupunem că materialul admite simetrie cubică în raport cu configurația relaxată. Dacă \mathbf{F} și \mathbf{F}^e caracterizează corespunzător starea plană de deformare generalizată (2.45), componenta D_{33} se exprimă prin

$$\begin{aligned} D_{33} &= \frac{1}{\bar{\mathcal{E}}_{33}} (\bar{\mathcal{E}}_{31} D_{11} - \bar{\mathcal{E}}_{32} D_{22} - 2\bar{\mathcal{E}}_{34} D_{12}) \\ &+ (\bar{\mathcal{E}}_{31} - \bar{\mathcal{E}}_{33}) G_{11}^S + (\bar{\mathcal{E}}_{32} - \bar{\mathcal{E}}_{33}) G_{22}^S + 2\bar{\mathcal{E}}_{34} G_{12}^S, \end{aligned} \quad (2.54)$$

și componentele tensiunii Cauchy T_{13}, T_{23} și T_{33} la momentul de timp t_0 se anulează, $T_{13}(t_0) = T_{23}(t_0) = T_{33}(t_0) = 0$, atunci starea plană de tensiune este realizată.

CAPITOLUL 3

Metode numerice în vâscoplasticitate

În acest capitol prezentăm metode numerice pentru a rezolva probleme cu date inițiale și la limită în probleme de elasto-vâscoplastice cu deformații finite cu dislocații. Rezultatele din acest capitol au fost prezentate în lucrările Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013a] și Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013, trimis spre publicare].

S-a descris MEF pentru rezolvarea egalității variaționale (2.42) pentru cazul tridimensional, respectiv bidimensional. Fiind o problemă qvasi-statică, odată cunoscută starea corpului la timpul t_n , se rezolvă problema variațională (2.42) în care singura necunoscută este câmpul vitezei \mathbf{v} . Odată calculat câmpul de viteze se determină la momentul următor de timp t_{n+1} toate marimile câmpurilor care intervin în sistemul diferentia (2.32-2.38) aplicând un algoritm de actualizare. Printr-un procedeu clasic de discretizare cu element finit se ajunge la un sistem liniar având ca necunoscută, vectorul vitezelor în toate nodurile rețelei. În continuare este descrisă metoda elementului finit pentru problema bidimensională în care se consideră starea plană de tensiune și starea plană de deformare generalizată.

Se dă o abordare numerică pentru rezolvarea problemei cu date inițiale și la limită, în care ecuația cu derivate parțiale este o ecuație neliniară parabolică, iar necunoscuta este o funcție scalară de variabile x, y . În cazul unui singur sistem de alunecare, ecuația de evoluție pentru densitatea scalară de dislocație a fost considerată de tip nelocal. Acest caz corespunde situației când avem un singur sistem de alunecare și ecuația de evoluție pentru densitatea scalară de dislocație a fost considerată de tip nelocal. Se construiește formularea slabă a problemei, iar în urma discretizării cu MEF se ajunge la un sistem diferențial a cărui necunoscută este vectorul constituit din valorile funcției căutate în nodurile rețelei. Utilizând metoda Euler implicit, se ajunge la un sistem algebric neliniar care va fi rezolvat prin metoda Newton-Raphson. În cazul în care avem mai multe sisteme de alunecare, prin urmare avem de integrat un sistem de ecuații neliniare de tip

parabolic, sistemul se transformă într-o ecuație vectorială. Cu alte cuvinte, necunoscuta este reprezentată sub forma unui vector cu N componente, fiecare componentă reprezentând densitatea scalară de dislocație ρ^α . Pentru liniarizarea sistemului neliniar, deoarece calculul jacobianului devine dificil, în acest caz, se utilizează metoda Crank-Nicolson.

Algoritmul implementat aici a fost validat folosind pachetul pdetool, conținut în programul Matlab, cu ajutorul interfeței grafice (GUI), pentru un caz mai simplu, în care termenii au fost aleși liniari. Intervalul de integrare a ecuației neliniare parabolice va fi considerat $[t_n, t_{n+1}]$, iar domeniul de integrare $\Omega_t = \Omega_{t_n}$ este presupus invariabil pe întreg intervalul $[t_n, t_{n+1}]$.

Vom descrie aplicarea metodei elementului finit pentru rezolvarea problemei variaționale (2.42) formulată la momentul de timp t . Să considerăm $(t_n)_{n=1,N}$ o discretizare în timp a intervalului $[t_0, t']$, cu $t_{n+1} = t_n + dt_n$. Presupunem, în continuare, că se cunoaște starea curentă de deformare a corpului la momentul de timp $t = t_n$, adică se cunosc valorile curente ale câmpurilor:

$$\mathbf{T}_n, \hat{\rho}_n, \mathbf{s}_n^\alpha, \mathbf{m}_n^\alpha, \rho_n^\alpha, \zeta_n^\alpha. \quad (3.1)$$

Fie $\Omega_{t_n} \subset \mathbf{R}^3$ domeniul ocupat de corp la momentul de timp t_n . Egalitatea variațională (2.42) scrisă la momentul de timp t_n este

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega_{t_n}} (\nabla \mathbf{v}) \mathbf{T}_n \cdot \nabla \mathbf{w} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \mathcal{E} [\mathbf{D}_n] \cdot \nabla \mathbf{w} \, d\mathbf{x} \\ & - \int_{\Omega_{t_n}} \{ \hat{\rho}_n \mathcal{E} [\mathbf{G}_n^S] + \mathbf{G}_n \mathbf{T}_n + \mathbf{T}_n \mathbf{G}_n^S \} \cdot \nabla \mathbf{w} \, d\mathbf{x} = \\ & = \int_{\Gamma_{1t_n}} \dot{\mathbf{s}}_t^* \cdot \mathbf{w} \, da + \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \dot{\mathbf{b}}_t \cdot \mathbf{w} \, d\mathbf{x}, \quad \forall \mathbf{w} \in \mathcal{V}_n. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Observația 3.1 *Singura necunoscută a problemei variaționale (3.2) este câmpul vitezelor \mathbf{v} .*

Se definesc, în continuare, mulțimea soluțiilor test și mulțimea funcțiilor pondere astfel:

$$\mathcal{S}_n = \left\{ \mathbf{v} \in (H^1(\Omega_{t_n}))^3 \mid \mathbf{v} = \mathbf{v}_t^*, \mathbf{x} \in \Gamma_{2t_n} \right\}, \mathcal{V}_n = \left\{ \mathbf{w} \in (H^1(\Omega_{t_n}))^3 \mid \mathbf{w} = \mathbf{0}, \mathbf{x} \in \Gamma_{2t_n} \right\}.$$

Fie \mathcal{S}_n^h și \mathcal{V}_n^h aproximații finite dimensionale ale spațiilor \mathcal{S}_n și respectiv \mathcal{V}_n . Vom folosi aproximarea Galerkin:

$$\mathbf{v}^h = \tilde{\mathbf{v}}^h + \bar{\mathbf{v}}^h$$

cu $\tilde{\mathbf{v}}^h \in \mathcal{V}_n^h$ ($\tilde{\mathbf{v}}^h|_{\Gamma_{2t_n}} = \mathbf{0}$) și $\bar{\mathbf{v}}^h \in \mathcal{S}_n^h$ ($\bar{\mathbf{v}}^h|_{\Gamma_{2t_n}} = \mathbf{v}_{t_n}^*$). Fie $\mathbf{w}^h \in \mathcal{V}_n^h$.

Vom înlocui în formularea slabă pe \mathbf{v} cu \mathbf{v}^h , iar pe \mathbf{w} cu \mathbf{w}^h . Fie discretizarea domeniului Ω_{t_n} în elemente finite: $\Omega_{t_n} = \bigcup_{e=1}^{n_{elem}} \Omega_{t_n}^e$.

Considerăm \mathcal{N} mulțimea indicilor nodurilor din domeniul Ω_t , \mathcal{N}_v mulțimea indicilor nodurilor situate pe Γ_{2t_n} (suprafața unde s-au impus vitezele). Scopul este de a calcula vitezele în nodurile rămase, adică în nodurile ale căror indici sunt din $\mathcal{N} \setminus \mathcal{N}_v$. Fie aproximarea:

$$\mathbf{w}^h = \sum_{I \in \mathcal{N} \setminus \mathcal{N}_v} \mathbf{N}_I^T(\mathbf{x}) \mathbf{w}_I = \tilde{\mathbf{N}}^T \tilde{\mathbf{w}} \quad (3.3)$$

unde \mathbf{N}_I^T este de forma:

$$\mathbf{N}_I^T = \begin{bmatrix} N_I & 0 & 0 \\ 0 & N_I & 0 \\ 0 & 0 & N_I \end{bmatrix}, \quad \text{iar} \quad \mathbf{w}_I = \begin{Bmatrix} w_I^1 \\ w_I^2 \\ w_I^3 \end{Bmatrix}. \quad (3.4)$$

În relația (3.3), $\tilde{\mathbf{w}}$ reprezintă vectorul global din care au fost eliminate componentele corespunzătoare nodurilor de pe suprafața Γ_{2t_n} .

Analog, se poate scrie pentru $\tilde{\mathbf{v}}^h$:

$$\tilde{\mathbf{v}}^h = \sum_{I \in \mathcal{N} \setminus \mathcal{N}_v} \mathbf{N}_I^T(\mathbf{x}) \mathbf{v}_I = \tilde{\mathbf{N}}^T \tilde{\mathbf{v}}. \quad (3.5)$$

$\tilde{\mathbf{v}}$ este vectorul necunoscut și conține vitezele în toate nodurile din domeniu, cu excepția celor de pe frontiera Γ_{2t_n} .

Scriem expresia pentru $\bar{\mathbf{v}}^h$:

$$\bar{\mathbf{v}}^h = \sum_{I \in \mathcal{N}_v} \mathbf{N}_I^T(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{v}}_I = \bar{\mathbf{N}}^T \bar{\mathbf{v}}. \quad (3.6)$$

Dacă introducem toți termenii prelucrați în formularea variațională, obținem:

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2) \bar{\mathbf{v}} &= - \left(\int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{B}}_3^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \bar{\mathbf{B}}_3 d\mathbf{x} + \int_{\Omega_{t_n}} \tilde{\mathbf{B}}_2^T \bar{\mathbf{B}}_1 d\mathbf{x} \right) \bar{\mathbf{v}} \\ &+ \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{B}}_3^T (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \mathbf{G}_n + 2\{\mathbf{G}_n \mathbf{T}_n\}^S) d\mathbf{x} \\ &+ \left(\int_{\Gamma_{1t_n}} \tilde{\mathbf{N}} \dot{\mathbf{s}}_t^* da + \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{N}} \dot{\mathbf{b}}_{t_n} \right) \end{aligned} \quad (3.7)$$

unde

$$\mathbf{K}_1 = \int_{\Omega_{t_n}} \tilde{\mathbf{B}}_2^T \tilde{\mathbf{B}}_1 d\mathbf{x}, \quad \mathbf{K}_2 = \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{B}}_3^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \tilde{\mathbf{B}}_3 d\mathbf{x} \quad (3.8)$$

$$\tilde{\mathbf{B}}_1 = \Delta_1 \tilde{\mathbf{N}}^T, \quad \tilde{\mathbf{B}}_2 = \Delta_2 \tilde{\mathbf{N}}^T, \quad \tilde{\mathbf{B}}_3 = \Delta_3 \tilde{\mathbf{N}}^T \quad (3.9)$$

sau scris compact:

$$\tilde{\mathbf{K}}\tilde{\mathbf{v}} = -\bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{v}} + \mathbf{f}, \quad (3.10)$$

unde

$$\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2, \quad (3.11)$$

$$\bar{\mathbf{K}} = \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{B}}_3^T \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \bar{\mathbf{B}}_3 d\mathbf{x} + \int_{\Omega_{t_n}} \tilde{\mathbf{B}}_2^T \bar{\mathbf{B}}_1 d\mathbf{x} \quad (3.12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f} = & \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{B}}_3^T (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \mathbf{G}_n + 2\{\mathbf{G}_n \mathbf{T}_n\}^S) d\mathbf{x} + \\ & + \left(\int_{\Gamma_{1t_n}} \tilde{\mathbf{N}} \dot{\mathbf{s}}_t^* da + \int_{\Omega_{t_n}} \hat{\rho}_n \tilde{\mathbf{N}} \dot{\mathbf{b}}_t d\mathbf{x} \right). \end{aligned} \quad (3.13)$$

La nivelul elementului e funcțiile de formă se scriu:

$$\tilde{\mathbf{N}}^T = \mathbf{N}^{eT} \tilde{\mathbf{A}}^e \quad \text{și} \quad \bar{\mathbf{N}}^T = \mathbf{N}^{eT} \bar{\mathbf{A}}^e. \quad (3.14)$$

Observația 3.2 Matricele $\tilde{\mathbf{A}}^e$ și $\bar{\mathbf{A}}^e$ reprezintă matricele de selecție.

Cu aceste precizări, putem scrie o formă echivalentă a relației (3.10)

$$\sum_e (\tilde{\mathbf{A}}^e)^T \mathbf{K}^e \tilde{\mathbf{A}}^e = - \sum_e (\tilde{\mathbf{A}}^e)^T \mathbf{K}^e \bar{\mathbf{A}}^e + \sum_e \tilde{\mathbf{A}}^{eT} \mathbf{f}^e, \quad (3.15)$$

unde

$$\mathbf{K}^e = \int_{\Omega_{t_n}^e} \mathbf{B}_2^{eT} \mathbf{B}_1^e d\mathbf{x} + \int_{\Omega_{t_n}^e} \hat{\rho}_n \mathbf{B}_3^{eT} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \mathbf{B}_3^e d\mathbf{x}, \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^e = & \int_{\Omega_{t_n}^e} \hat{\rho}_n \mathbf{B}_3^{eT} (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_n \mathbf{G}_n + 2\{\mathbf{G}_n \mathbf{T}_n\}^S) d\mathbf{x} + \\ & + \left(\int_{\Gamma_{1t_n}^e} \mathbf{N}^e \dot{\mathbf{s}}_t^* da + \int_{\Omega_{t_n}^e} \hat{\rho}_n \mathbf{N}^e \dot{\mathbf{b}}_t d\mathbf{x} \right). \end{aligned} \quad (3.17)$$

Precizăm că pentru fiecare element au loc relațiile:

$$\mathbf{B}_i^e = \Delta_i \mathbf{N}^e, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3.18)$$

Dăm mai jos succint rezultatele obținute în urma discretizării problemei variaționale prin MEF pentru stare plană de tensiune.

Pentru discretizare, au fost considerate elemente finite triunghiulare, iar funcțiile de formă sunt liniare pe fiecare element.

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{K}}\tilde{\mathbf{v}} &= -\bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{v}} + \mathbf{f}, \\ \text{unde} \\ \tilde{\mathbf{K}} &= \sum_e (\tilde{\mathbf{A}}^e)^T \mathbf{K}^e \tilde{\mathbf{A}}^e, \quad \bar{\mathbf{K}} = \sum_e (\tilde{\mathbf{A}}^e)^T \mathbf{K}^e \bar{\mathbf{A}}^e, \quad \mathbf{f} = \sum_e (\tilde{\mathbf{A}}^e)^T \mathbf{f}^e. \end{aligned} \quad (3.19)$$

$\tilde{\mathbf{v}}$ este vectorul ale cărui componente reprezintă viteza în fiecare nod, în afara acelor în care au fost impuse vitezele. Pe de altă parte, vectorul $\bar{\mathbf{v}}$ conține valorile vitezei în acele noduri în care au fost impuse vitezele. Dăm mai jos expresiile mărimilor ce apar în formula (3.19):

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^e &= (\mathbf{B}_2^{eT} \mathbf{B}_1^e + \hat{\rho} \mathbf{B}_4^{eT} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_n \mathbf{B}_3^e) \mathcal{A}^e, \\ \mathbf{f}^e &= (\hat{\rho}_n \mathbf{B}_4^{eT} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_n \mathbf{G}_n^S - \hat{\rho}_n \mathbf{B}_4^{eT} \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_n \mathbf{q}_n + \mathbf{B}_4^{eT} \mathbf{Q}_n) \mathcal{A}^e + \int_{\partial\Omega_{t_n}^e \cap \partial\Omega_{t_n}} \mathbf{N}^e \dot{\mathbf{s}}_t^* da, \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\mathbf{B}_1^e = \Delta_1 \mathbf{N}^{eT}, \mathbf{B}_2^e = \Delta_2 \mathbf{N}^{eT}, \mathbf{B}_3^e = \Delta_3 \mathbf{N}^{eT}, \mathbf{B}_4^e = \Delta_4 \mathbf{N}^{eT}.$$

$$\mathbf{N}^{eT} = \begin{bmatrix} N_1^e & 0 & N_2^e & 0 & N_3^e & 0 \\ 0 & N_1^e & 0 & N_2^e & 0 & N_3^e \end{bmatrix}, \quad (3.21)$$

$$\Delta_1 = \begin{pmatrix} T_{11} \frac{\partial}{\partial x_1} + T_{12} \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & T_{12} \frac{\partial}{\partial x_1} + T_{22} \frac{\partial}{\partial x_2} \\ T_{12} \frac{\partial}{\partial x_1} + T_{22} \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & T_{11} \frac{\partial}{\partial x_1} + T_{12} \frac{\partial}{\partial x_2} \end{pmatrix} \quad (3.22)$$

$$\Delta_2 = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_1} \end{pmatrix} \quad (3.23)$$

$$\Delta_3 = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{1}{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{33}} \left(-\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{31} \frac{\partial}{\partial x_1} - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{34} \frac{\partial}{\partial x_2} \right) & \frac{1}{\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{33}} \left(-\bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{32} \frac{\partial}{\partial x_2} - \bar{\boldsymbol{\epsilon}}_{34} \frac{\partial}{\partial x_1} \right) \\ \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_1} \end{pmatrix} \quad (3.24)$$

$$\Delta_4 = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_1} \end{pmatrix}. \quad (3.25)$$

$$\bar{\mathcal{E}}_n = \begin{pmatrix} \bar{\mathcal{E}}_{11} & \bar{\mathcal{E}}_{12} & \bar{\mathcal{E}}_{13} & \bar{\mathcal{E}}_{14} \\ \bar{\mathcal{E}}_{21} & \bar{\mathcal{E}}_{22} & \bar{\mathcal{E}}_{23} & \bar{\mathcal{E}}_{24} \\ \bar{\mathcal{E}}_{41} & \bar{\mathcal{E}}_{42} & \bar{\mathcal{E}}_{43} & \bar{\mathcal{E}}_{44} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{G}_n^S = \begin{pmatrix} G_{11}^S \\ G_{22}^S \\ G_{33}^S \\ G_{12}^S \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{q}_n = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\bar{\mathcal{E}}_{33}} \{ \bar{\mathcal{E}}_{31} G_{11}^S + \bar{\mathcal{E}}_{32} G_{22}^S + \bar{\mathcal{E}}_{33} G_{33}^S + 2\bar{\mathcal{E}}_{34} G_{12}^S \} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{Q}_n = \begin{pmatrix} 2(G_{11}T_{11} + G_{12}T_{21}) \\ 2(G_{21}T_{12} + G_{22}T_{22}) \\ G_{11}T_{12} + G_{12}T_{22} + G_{21}T_{11} + G_{22}T_{21} \end{pmatrix}.$$

Aici, \mathcal{A}^e reprezintă aria elementului e în configurația deformată la momentul de timp t_n .

Prezentăm în continuare rezolvarea ecuației neliniare de tip parabolic ce descrie evoluția densității scalare de dislocație.

Problema 3.1 (Ecuația neliniară de tip parabolic) Să se determine $\rho(\mathbf{x}, t)$ care verifică următoarea problemă la limită și cu date inițiale:

- Ecuația neliniară de tip parabolic:	
$f(\mathbf{x}, t, \rho) \frac{d\rho}{dt} = \nabla \cdot (k\nabla\rho) + g(\mathbf{x}, t, \rho), \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \Omega_{t_n} \times [t_n, t_{n+1}]$	Pb. 3.1 ₁
- Condiția la frontieră:	
$k \frac{\partial \rho}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{n} \cdot \nabla(k\rho) = i(\rho), \quad \forall(\mathbf{x}, t) \in \partial\Omega_{t_n} \times [t_n, t_{n+1}]$	Pb. 3.1 ₂
- Condiția inițială:	
$\rho(\mathbf{x}, t_n) = \rho_n(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_{t_n}, \quad \Omega_{t_n} \subset \mathbb{R}^2$	Pb. 3.1 ₃

unde $f(\cdot, \cdot, \cdot) : \Omega_{t_n} \times [t_n, t_{n+1}] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ și $g(\cdot, \cdot, \cdot) : \Omega_{t_n} \times [t_n, t_{n+1}] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $i(\cdot, \cdot, \cdot) : \partial\Omega_{t_n} \times [t_n, t_{n+1}] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sunt funcții date.

Pentru rezolvarea numerică a acestei probleme se va scrie mai întâi formularea slabă:

$$\int_{\Omega_{t_n}} f(\rho) \frac{\partial \rho}{\partial t} \eta d\mathbf{x} = - \int_{\Omega_{t_n}} k \nabla \rho \cdot \nabla \eta d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega_{t_n}} i(\rho) \eta da + \int_{\Omega_{t_n}} g(\rho) \eta d\mathbf{x} \quad (3.27)$$

cu $\eta \in \mathcal{V} = H^1(\Omega_{t_n})$. Fie \mathcal{V}^h subspațiul finit dimensional al lui \mathcal{V} și $\rho^h, \eta^h \in \mathcal{V}^h$. În aceste condiții putem scrie forma semi-discretă a formulării slabe, înlocuind spațiul \mathcal{V} cu subspațiul \mathcal{V}^h .

Problema 3.1* Să se determine $\rho_h(t) \in V_h, t \in [t_n, t_{n+1}]$ astfel încât să verifice următoarele relații:

<p>- Forma semi-discretă a formulării slabe:</p> $\int_{\Omega_{t_n}} f(\rho^h) \frac{\partial \rho^h}{\partial t} \eta^h d\mathbf{x} = - \int_{\Omega_{t_n}} k \nabla \rho^h \cdot \nabla \eta^h d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega_{t_n}} i(\rho^h) \eta^h ds,$ <p>$\forall \eta \in V_h, t \in [t_n, t_{n+1}]$</p> <p>- Condiția inițială:</p> $\rho_h(\mathbf{x}, t_n) = \rho_n(\mathbf{x}), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega_{t_n}$	Pb. 3.1*
--	----------

Fie discretizarea domeniului $\Omega_{t_n} = \cup_{e=1, n_{elem}} \Omega_{t_n}^e$ și aproximările

$$\rho^h = \mathbf{N}^T \check{\rho}, \quad \eta^h = \mathbf{N}^T \check{\eta},$$

unde

$$\mathbf{N}^T = [N_1, N_2, \dots, N_{n_{nod}}] \quad \text{și} \quad \check{\rho}^T = [\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{n_{nod}}].$$

Cu aceste precizări, relația (Pb. 3.1*) devine:

$$\begin{aligned} \left(\int_{\Omega_{t_n}} f(\rho^h) \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\mathbf{x} \right) \dot{\check{\rho}} = & - \left(\int_{\Omega_{t_n}} k \mathbf{B}^T \mathbf{B} d\mathbf{x} \right) \check{\rho} + \int_{\partial\Omega_{t_n}} i(\rho^h) \mathbf{N} da \\ & + \int_{\Omega_{t_n}} g(\rho^h) \mathbf{N} d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

unde $\mathbf{B} = \Delta \mathbf{N}^T$ și $\Delta = \left[\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2} \right]^T$. Relația (3.28) reprezintă un sistem diferențial de tipul:

$$\mathbf{M}(t, \check{\rho}) \dot{\check{\rho}} + \mathbf{K}(t, \check{\rho}) \check{\rho} = \mathbf{F}(t, \check{\rho}) \quad \text{unde}$$

$$\mathbf{M}(t, \check{\rho}) = \int_{\Omega_{t_n}} f(\rho^h) \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\mathbf{x} \quad (3.29)$$

$$\mathbf{K}(t, \check{\rho}) = \int_{\Omega_{t_n}} k \mathbf{B}^T \mathbf{B} d\mathbf{x}$$

$$\mathbf{F}(t, \check{\rho}) = \int_{\partial\Omega_{t_n}} i(\rho^h) \mathbf{N} da + \int_{\Omega_{t_n}} g(\rho^h) \mathbf{N} d\mathbf{x}$$

Pentru rezolvarea sistemului diferențial (3.29) se va aplica metoda Euler implicită. Derivata temporală se aproximează prin

$$\dot{\check{\rho}} \approx \frac{\check{\rho}_{n+1} - \check{\rho}_n}{t_{n+1} - t_n}. \quad (3.30)$$

Considerăm incrementul de timp la pasul n notat prin dt_n . În relația (3.29) scriem toate mărimile la momentul t_{n+1} , iar pe $\dot{\boldsymbol{\rho}}$ îl înlocuim cu aproximarea (3.30).

$$\mathbf{M}(t_{n+1}, \check{\boldsymbol{\rho}}_{n+1}) \frac{\check{\boldsymbol{\rho}}_{n+1} - \check{\boldsymbol{\rho}}_n}{t_{n+1} - t_n} + \mathbf{K}(t_{n+1}) \check{\boldsymbol{\rho}}_{n+1} = \mathbf{F}(t_{n+1}, \check{\boldsymbol{\rho}}_{n+1}) \quad (3.31)$$

sau

$$\left(\frac{\mathbf{M}_{n+1}}{dt_n} + \mathbf{K}_{n+1} \right) \check{\boldsymbol{\rho}}_{n+1} - \frac{1}{dt_n} \mathbf{M}_{n+1} \check{\boldsymbol{\rho}}_n - \mathbf{F}_{n+1} = 0. \quad (3.32)$$

Sistemul (3.32) reprezintă un sistem neliniar în necunoscuta $\check{\boldsymbol{\rho}}_{n+1}$. Pentru rezolvarea acestui sistem se aplică metoda Newton-Raphson.

În cazul în care se activează mai multe sisteme de alunecare se rezolvă sistemul de ecuații neliniare de tip parabolic.

Introducem vectorul $\boldsymbol{\rho} = [\rho^1, \dots, \rho^N]^T$. Ecuația (2.38) poate fi privită ca un caz particular al unei ecuații mai generale de forma:

$$\mathbf{f}(\boldsymbol{\rho}) \dot{\boldsymbol{\rho}} = \nabla \cdot (\mathbf{c} \nabla \boldsymbol{\rho}) + \mathbf{g}(\boldsymbol{\rho}), \quad (3.33)$$

unde

$$\mathbf{f} = (f_{ij})_{i,j=1,\overline{N}}, \quad \mathbf{c} = (c_{ij})_{i,j=1,\overline{N}}, \quad (3.34)$$

$$\nabla \boldsymbol{\rho} = [\nabla \rho^1, \dots, \nabla \rho^N]^T, \quad \nabla \rho^\alpha = \left[\frac{\partial \rho^\alpha}{\partial x_1}, \frac{\partial \rho^\alpha}{\partial x_2} \right]^T, \quad \mathbf{g} = [g_1, \dots, g_N]^T,$$

Înmulțind ecuația (3.33) cu o funcție pondere arbitrară $\boldsymbol{\psi} = [\psi^1, \dots, \psi^N]^T$ și integrând pe domeniul Ω_{t_n} , obținem următoarea relație:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{f}(\boldsymbol{\rho}) \dot{\boldsymbol{\rho}} \cdot \boldsymbol{\psi} \, d\mathbf{x} &= \int_{\partial\Omega_{t_n}} (\mathbf{n} \cdot \mathbf{c} \nabla \boldsymbol{\rho}) \cdot \boldsymbol{\psi} \, da - \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{c} \nabla \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\psi} \, d\mathbf{x} \\ &+ \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{g}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \boldsymbol{\psi} \, d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Dacă impunem condițiile la frontieră $\mathbf{n} \cdot \mathbf{c} \nabla \boldsymbol{\rho} = \mathbf{h}(\boldsymbol{\rho})$, unde $\mathbf{h}(\boldsymbol{\rho}) = [h_1, \dots, h_N]^T$, atunci forma slabă (3.35) pe intervalul de timp $[t_n, t_{n+1}]$ devine:

$$\int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{f}(\boldsymbol{\rho}) \dot{\boldsymbol{\rho}} \cdot \boldsymbol{\psi} \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega_{t_n}} \mathbf{h}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \boldsymbol{\psi} \, da - \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{c} \nabla \boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\psi} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega_{t_n}} \mathbf{g}(\boldsymbol{\rho}) \cdot \boldsymbol{\psi} \, d\mathbf{x}. \quad (3.36)$$

Fie $\boldsymbol{\rho}^h = \mathbf{N}_\rho^e \mathbf{A}^e \check{\boldsymbol{\rho}}$ o aproximare a soluției $\boldsymbol{\rho}$ pe elementul e , unde $\check{\boldsymbol{\rho}}$ reprezintă vectorul global al valorilor nodale pentru densitățile de dislocație, adică

$\check{\boldsymbol{\rho}} = [\rho_1^1, \dots, \rho_1^N, \dots, \rho_{n_{nod}}^1, \dots, \rho_{n_{nod}}^N]^T$, n_{nod} reprezintă numărul de noduri ale rețelei, iar \mathbf{N}_ρ^e funcțiile de formă exprimate prin:

$$\mathbf{N}_\rho^{eT} = \begin{bmatrix} N_1^e & 0 & \dots & 0 & N_2^e & 0 & \dots & 0 & N_3^e & 0 & \dots & 0 \\ 0 & N_1^e & \dots & 0 & 0 & N_2^e & \dots & 0 & 0 & N_3^e & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & N_1^e & 0 & 0 & \dots & N_2^e & 0 & 0 & \dots & N_3^e \end{bmatrix}$$

În urma discretizării cu element finit, relația (3.35) devine:

$$\begin{aligned} \sum_e \mathbf{A}^{eT} \left(\int_{\Omega_{t_n}^e} \mathbf{N}_\rho^e \mathbf{f}(\boldsymbol{\rho}^h) \mathbf{N}_\rho^{eT} d\mathbf{x} \right) \mathbf{A}^e \dot{\check{\boldsymbol{\rho}}} &= \sum_e \mathbf{A}^{eT} \int_{\partial\Omega_{t_n}^e} \mathbf{N}_\rho^e \mathbf{h}(\boldsymbol{\rho}^h) da - \\ &- \sum_e \mathbf{A}^{eT} \left(\int_{\Omega_{t_n}^e} (\Delta \mathbf{N}_\rho^{eT})^T \mathbf{c} (\Delta \mathbf{N}_\rho^{eT}) d\mathbf{x} \right) \mathbf{A}^e \check{\boldsymbol{\rho}} + \sum_e \mathbf{A}^{eT} \int_{\Omega_{t_n}^e} \mathbf{N}_\rho^e \mathbf{g}(\boldsymbol{\rho}^h) d\mathbf{x}, \end{aligned} \quad (3.37)$$

sau

$$\left(\sum_e \mathbf{A}^{eT} \mathbf{M}^e \mathbf{A}^e \right) \dot{\check{\boldsymbol{\rho}}} = - \left(\sum_e \mathbf{A}^{eT} \mathbf{K}^e \mathbf{A}^e \right) \check{\boldsymbol{\rho}} + \sum_e \mathbf{A}^{eT} \mathbf{f}^e. \quad (3.38)$$

Relație (3.38) reprezintă un sistem diferențial de tipul

$$\mathbf{M}(\check{\boldsymbol{\rho}}) \dot{\check{\boldsymbol{\rho}}} + \mathbf{K}(\check{\boldsymbol{\rho}}) \check{\boldsymbol{\rho}} = \mathbf{F}(\check{\boldsymbol{\rho}}), \quad (3.39)$$

care se rezolvă prin metoda Crank-Nicolson.

Se va discretiza în continuare sistemul diferențial care descrie modelul local.

Fie condițiile inițiale de la momentul de timp t_0 , atașate sistemului diferențial (2.34)-(2.37): $\mathbf{T}(t_0) = \mathbf{0}$, $\mathbf{F}^e(t_0) = \mathbf{I}$, $\mathbf{m}^\alpha(t_0) = \bar{\mathbf{m}}^\alpha$, $\mathbf{s}^\alpha(t_0) = \bar{\mathbf{s}}^\alpha$, $\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0$, $\rho^\alpha(t_0) = \rho_0$, $\zeta^\alpha(t_0) = \zeta_0$.

Odată calculat numeric câmpul vitezelor \mathbf{v} la momentul de timp t_n , se poate reconstitui gradientul vitezei \mathbf{L} și viteza de deformare \mathbf{D} . În continuare, aplicând o procedură de actualizare de tip Euler explicit a relațiilor corespunzătoare sistemului diferențial care descrie modelul, se obțin valorile câmpurilor

$$\mathbf{x}_{n+1}, \frac{\mathbf{T}_{n+1}}{\hat{\rho}_{n+1}}, \mathbf{F}_{n+1}^e, \mathbf{s}_{n+1}^\alpha, \mathbf{m}_{n+1}^\alpha, \zeta_{n+1}^\alpha, \rho_{n+1}^\alpha, \gamma_{n+1}^\alpha. \quad (3.40)$$

la momentul de timp t_{n+1} .

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n + \mathbf{v}_n dt_n, \quad (\mathbf{F}_t)_{n+1} = \mathbf{I} + \mathbf{L}_n dt_n. \quad (3.41)$$

$$(\mathbf{S}_t)_{n+1} = (\mathbf{I} + \mathbf{L}_n dt_n) \mathbf{T}_n + (\hat{\rho}_n \mathcal{E}_n[\mathbf{D}_n] - \hat{\rho}_n \mathcal{E}_n[\mathbf{G}_n^S] - 2\{\mathbf{G}_n \mathbf{T}_n\}^S) dt_n. \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned}\mathbf{T}_{n+1} &= \frac{1}{\det(\mathbf{F}_t)_{n+1}} (\mathbf{S}_t)_{n+1} (\mathbf{F}_t^T)_{n+1}, & \hat{\rho}_{n+1} &= \frac{\hat{\rho}_n}{\det(\mathbf{F}_t)_{n+1}}, \\ \mathbf{F}_{n+1} &= (\mathbf{F}_t)_{n+1} \mathbf{F}_n,\end{aligned}\tag{3.43}$$

$$\mathbf{F}_{n+1}^e = \mathbf{F}_n^e + (\mathbf{L}_n - \mathbf{G}_n) \mathbf{F}_n^e dt_n$$

$$\begin{aligned}\mathbf{s}_{n+1}^\alpha &= \mathbf{s}_n^\alpha + \mathbf{L}_n \mathbf{s}_n^\alpha dt_n - \mathbf{G}_n \mathbf{s}_n^\alpha dt_n, & \alpha &= 1, \dots, N, \\ \mathbf{m}_{n+1}^\alpha &= \mathbf{m}_n^\alpha - \mathbf{L}_n^T \mathbf{m}_n^\alpha dt_n + \mathbf{G}_n^T \mathbf{m}_n^\alpha dt_n, & \alpha &= 1, \dots, N, \\ \zeta_{n+1}^\alpha &= \sum_{\beta=1}^N h_n^{\alpha\beta} |\nu_n^\beta| dt_n + \zeta_n^\alpha, & \alpha &= 1, \dots, N, \quad \text{cu} \\ h_n^{\alpha\beta} &= h^{\alpha\beta}(t_n), \\ \gamma_{n+1}^\alpha &= \nu_n^\alpha dt_n + \gamma_n^\alpha, \\ \rho_{n+1}^\alpha &= \rho_n^\alpha + \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L_n^\alpha} - 2y_c \rho_n^\alpha \right) |\nu_n^\alpha| dt_n, \\ L_n^\alpha &= K \left(\sum_{q \neq \alpha} \rho_n^q \right)^{-1/2}, & \alpha &= 1, \dots, N.\end{aligned}\tag{3.44}$$

$$\begin{aligned}\nu_{n+1}^\alpha &= \dot{\gamma}_0^\alpha \left| \frac{J_{n+1} \mathbf{T}_{n+1} \mathbf{m}_{n+1}^\alpha \cdot \mathbf{s}_{n+1}^\alpha}{\zeta_{n+1}^\alpha} \right|^n \text{sign}(\mathbf{T}_{n+1} \mathbf{m}_{n+1}^\alpha \cdot \mathbf{s}_{n+1}^\alpha) \mathcal{H}(\mathcal{F}_{n+1}^\alpha), \\ \alpha &= 1, \dots, N,\end{aligned}\tag{3.45}$$

$$\mathbf{G}_{n+1} = \sum_{\beta=1}^N \nu_{n+1}^\beta \left(\mathbf{m}_{n+1}^\beta \otimes \mathbf{s}_{n+1}^\beta \right),$$

$$\mathcal{F}_{n+1}^\alpha = |\tau_{n+1}^\alpha| - \zeta_{n+1}^\alpha = |\det(\mathbf{F}_{n+1}) \mathbf{T}_{n+1} \mathbf{m}_{n+1}^\alpha \cdot \mathbf{s}_{n+1}^\alpha| - \zeta_{n+1}^\alpha.$$

$$\mathcal{H}(\mathcal{F}_{n+1}^\alpha) = \begin{cases} 0, & \text{dacă } \mathcal{F}_{n+1}^\alpha < 0 \\ 1, & \text{dacă } \mathcal{F}_{n+1}^\alpha \geq 0 \end{cases}\tag{3.46}$$

CAPITOLUL 4

Algoritmi numerici pentru rezolvarea problemelor cu date inițiale și la limită

Rezultatele prezentate în acest capitol au fost publicate în lucrările Cleja-Țigoiu et al. [2011], Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013b] și Cleja-Țigoiu și Pașcan [2013c]. În acest capitol a fost rezolvată numeric o problemă de forfecare simplă (în deformații) pentru procese de deformare și tensiune omogenă. Sistemul complet de ecuații diferențiale care descrie modelul a fost rezolvat prin metoda Runge-Kutta de ordinul 4. A fost modelată o bandă infinită supusă la forfecare simplă (în tensiuni). S-a considerat cazul unui singur sistem de alunecare, iar ecuația pentru densitatea de dislocație a fost considerată de tip nelocal. Deasemenea s-a studiat rolul condiției de activare asupra deformabilității corpului.

Deasemenea a fost simulată o experiență de compresiune a unei plăci unde au fost considerate toate sistemele care se activează (pentru cazul de față sunt 8 sisteme). Au fost puse în evidență efecte clare de forfecare. Pentru probleme de tracțiune a unei plăci cu neregularitate geometrică s-au considerat seturi de câte două sisteme de alunecare. S-au scos în evidență zonele care se deformează plastic, precum și efectul sistemelor de alunecare asupra comportamentului corpului. S-a considerat o placă dreptunghiulară cu o neomogenitate centrală a densității de dislocație și s-a studiat efectul local și nelocal.

Problema 4.1 *Fie un proces de deformare omogenă cu gradientul de deformare $t \in [t_0, t'] \rightarrow \mathbf{F}(t) = \mathbf{I} + F_{21}\mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1$, descriind o forfecare simplă. Să se determine:*

\mathbf{S} - tensorul Piola-Kirchhoff,

\mathbf{F}^p - distorsiunea plastică,

ζ^α - parametrii de ecruisare,

ρ^α - densitățile de dislocație,

care satisfac următorul sistem de ecuații:

<i>Ecuația constitutivă de tip elastic:</i>	$\mathbf{S} = \hat{\rho}_0 \mathbf{F}(\mathbf{F}^p)^{-1} [\lambda(\text{tr}(\mathbf{E}^e)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}^e)] (\mathbf{F}^p)^{-T}$ $\mathbf{E}^e = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{F}^p)^{-T} \mathbf{C} (\mathbf{F}^p)^{-1} - \mathbf{I} \right]$ cu $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$
<i>Ecuația de evoluție a distorsiunii plastice:</i>	$\dot{\mathbf{F}}^p = \sum_{\alpha=1}^{12} \nu^\alpha (\bar{\mathbf{s}}^\alpha \otimes \bar{\mathbf{m}}^\alpha) \mathbf{F}^p$ $\nu^\alpha = \nu_0^\alpha \left \frac{\tau^\alpha}{\zeta^\alpha} \right ^n \text{sgn}(\tau^\alpha) \mathcal{H}(\mathcal{F}^\alpha), \quad \alpha = 1, \dots, N$ $\mathcal{F}^\alpha := \tau^\alpha - \zeta^\alpha \geq 0$ cu $\tau^\alpha = \frac{1}{\hat{\rho}_0} (\mathbf{S}(\mathbf{F}^p \bar{\mathbf{m}}^\alpha)) \cdot (\mathbf{F}^e \bar{\mathbf{s}}^\alpha)$
<i>Ecuația de evoluție pentru parametrii de ecrusare</i>	$\dot{\zeta}^\alpha = \sum_{\beta=1}^{12} h^{\alpha\beta} \nu^\alpha $ $h^{\alpha\beta} = \frac{\mu}{2} a^{\alpha\beta} \left(\sum_q a^{\alpha q} \rho^q \right)^{-1/2}$ $\times \left\{ \frac{1}{K} \left(\sum_{q \neq \alpha} \rho^q \right)^{1/2} - 2y_c \rho^\beta \right\}$
<i>Ecuația de evoluție pentru densitățile de dislocație</i>	$\dot{\rho}^\alpha = \frac{1}{b} \left(\frac{1}{L^\alpha} - 2y_c \rho^\alpha \right) \nu^\alpha $ $L^\alpha = K \left(\sum_{q \neq \alpha} \rho^q \right)^{-1/2}$

Numărul maxim de necunoscute este 33: 9 componente ale distorsiunii plastice, 12 parametrii de ecrusare și 12 densități de dislocație.

Tensorul de tensiune Piola-Kirchhoff \mathbf{S} cu 9 componente este dat explicit ca funcție de $\mathbf{F}(t)$ și \mathbf{F}^p .

Sistemul diferențial în care gradientul de deformație $t \rightarrow \mathbf{F}(t)$ este de clasă $C^1([t_0, t'], \text{Lin}^+)$ pe porțiuni, poate fi scris formal astfel:

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{F}^p, \zeta^\alpha, \rho^\alpha) = f(\mathbf{F}(t), \mathbf{F}^p, \zeta^\alpha, \rho^\alpha; \mathbf{S}) \mathcal{H}(\mathcal{F}^\alpha), \quad (4.1)$$

unde $\mathcal{F}^\alpha = \mathcal{F}^\alpha(\mathbf{F}(t), \mathbf{F}^p, \zeta^\alpha; \mathbf{S})$.

Problema 4.2 *Data fiind funcția $t \in [t_0, t'] \rightarrow S_{13}(t)$, continuă și diferențiabilă pe porțiuni, să se determine:*

$\mathbf{F} = \mathbf{F}(z, t)$ - gradientul de deformație;

$\mathbf{F}^p = \mathbf{F}^p(z, t)$ - distorsiunea plastică (sau $\gamma = \gamma(z, t)$ -forfecare plastică);

$\rho = \rho(z, t)$ - densitatea de dislocație,

definite pe $[0, L] \times [t_0, t']$, care verifică următoarele relații:

<i>Ecuția de echilibru</i>	$\operatorname{div} \mathbf{S} = 0$	<i>Pb. 4.2₁</i>
<i>Condiția de simetrie</i>	$\mathbf{F}\mathbf{S}^T = \mathbf{S}\mathbf{F}^T$	<i>Pb. 4.2₂</i>
<i>Ecuția constitutivă de tip elastic</i>	$\mathbf{S} = \mathbf{F}(\mathbf{F}^p)^{-1} [\lambda(\operatorname{tr}(\mathbf{E}^e)\mathbf{I} + 2\mu\mathbf{E}^e)] (\mathbf{F}^p)^{-T}$ $\mathbf{E}^e = \frac{1}{2} [(\mathbf{F}^p)^{-T} \mathbf{C}(\mathbf{F}^p)^{-1} - \mathbf{I}], \mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F}$	
<i>Ecuția de evoluție a distorsiunii plastice</i>	$\dot{\mathbf{F}}^p = \nu(\bar{\mathbf{s}} \otimes \bar{\mathbf{m}})\mathbf{F}^p$ $\nu \equiv \dot{\gamma} = \nu_0 \left \frac{\tau}{\zeta} \right ^n \operatorname{sgn}(\tau) \mathcal{H}(\mathcal{F})$ $\mathcal{F} := \tau - \zeta \geq 0$ cu $\tau = \mathbf{S}\mathbf{F}^p \bar{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{F}^e \bar{\mathbf{s}}$	
<i>Ecuția de evoluție a densității de dislocație</i>	$\dot{\rho} = D \left \frac{S_{13}(t)F_{11}}{\zeta(\rho)} \right ^n \left(k\Delta\rho - \frac{\partial\psi_T}{\partial\rho} \right) \mathcal{H}(\tau - \zeta(\rho))$ $\zeta = \zeta(\rho), \psi_T = \psi_T(\rho), k$ și D date	<i>Pb. 4.2₅</i>

Se consideră un monocristal de formă rectangulară supus unei compresiuni simple în condiții de stare plană de tensiune, vezi în Figura 4.1. Pentru a elimina o rotație rigidă a plăcii, se fixează un punct al plăcii, în cazul de față $(0, 0, 0)$.

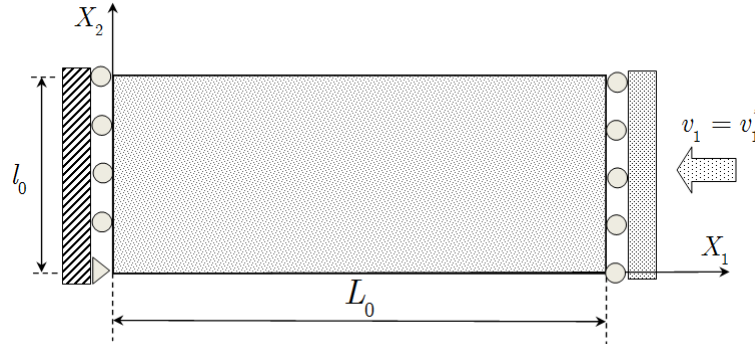


Figura 4.1: Monocristal supus la compresiune în condițiile stării plane de tensiune.

Condițiile macroscopice pe frontieră sunt considerate de tipul:

$$\begin{cases} v_1 = 0, & \dot{\mathbf{s}}_t \cdot \mathbf{i}_2 = 0 & \text{pentru} & X_1 = 0, & \forall X_2 \in [0, l_0] \\ v_1 = v_1^*, & \dot{\mathbf{s}}_t \cdot \mathbf{i}_2 = 0 & \text{pentru} & X_1 = L_0, & \forall X_2 \in [0, l_0] \\ \dot{\mathbf{s}}_t = 0 & & \text{pentru} & X_2 = 0, & \forall X_1 \in [0, L_0] \\ \dot{\mathbf{s}}_t = 0 & & \text{pentru} & X_2 = l_0, & \forall X_1 \in [0, L_0] \end{cases} \quad (4.2)$$

Pentru discretizarea cu element finit s-au considerat 1066 elemente și 585 noduri, iar funcțiile de formă au fost alese lineare pe element. Se analizează rezultatele numerice în cazul celor 4 grupuri de sisteme de alunecare care devin active pentru cazul compresiunii uniaxiale. Grupuri de sisteme de alunecare care devin active sunt: $(\bar{\mathbf{s}}^1, \bar{\mathbf{m}}^1)$, $(\bar{\mathbf{s}}^7, \bar{\mathbf{m}}^7)$, $(\bar{\mathbf{s}}^2, \bar{\mathbf{m}}^2)$, $(\bar{\mathbf{s}}^4, \bar{\mathbf{m}}^4)$, $(\bar{\mathbf{s}}^6, \bar{\mathbf{m}}^6)$, $(\bar{\mathbf{s}}^{12}, \bar{\mathbf{m}}^{12})$ și $(\bar{\mathbf{s}}^8, \bar{\mathbf{m}}^8)$, $(\bar{\mathbf{s}}^{10}, \bar{\mathbf{m}}^{10})$.

În Figura 4.5 a fost reprezentată componenta de forfecare a gradientului de deformație. Conform acestei figuri se observă un comportament dominant de

forfecare. În Figura 4.4 a fost reprezentată componenta diagonală F_{11} a gradientului de deformației pe placa deformată. În Figura 4.2 a fost reprezentată densitatea totală de dislocații. Conform acestei figuri se observă o dezvoltare a dislocațiilor spre capetele diagonalei plăcii. În Figura 4.3 a fost reprezentată forfecarea plastică totală pe placa deformată.

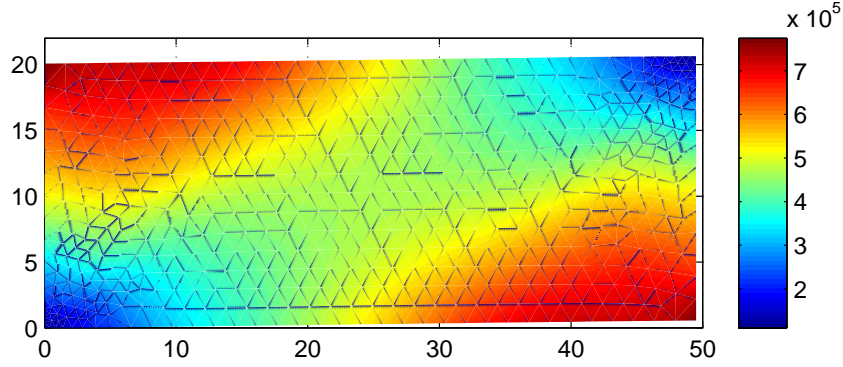


Figura 4.2: Distribuția densității totale de dislocație $2(\rho^1 + \rho^2 + \rho^6 + \rho^8) + 4\rho_0$ pe placa supusă unei deformații cu 1%.

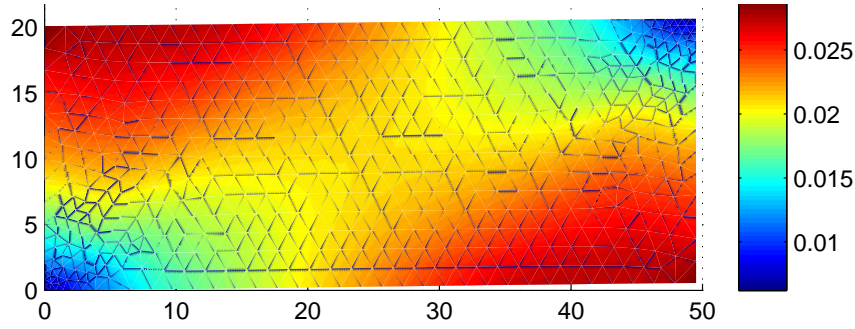


Figura 4.3: Distribuția forfecării plastice totale $2(|\gamma^1| + |\gamma^2| + |\gamma^6| + |\gamma^8|)$ pe placa supusă unei deformații cu 1%.

În continuare se simulează numeric tracțiunea unui monocristal cu structura FCC. Se impun următoarele condiții pe frontieră:

$$\begin{cases} v_1 = 0, v_2 = 0 & \text{pentru } X_1 = 0, X_2 \in [0, l_0], \\ v_1 = v_1^*, v_2 = 0 & \text{pentru } X_1 = L_0, X_2 \in [0, l_0], \\ \dot{s}_t = 0 & \text{pentru } X_2 = 0, X_1 \in [0, L_0], \\ \dot{s}_t = 0 & \text{pentru } X_2 = l_0, X_1 \in [0, L_0]. \end{cases} \quad (4.3)$$

În modelarea numerică au fost considerate 1164 elemente și 639 noduri. a. Cazul sistemelor de alunecare: (\bar{s}^1, \bar{m}^1) și (\bar{s}^7, \bar{m}^7) .

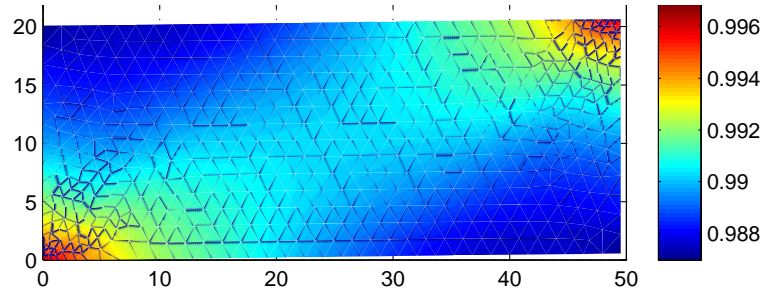


Figura 4.4: Distribuția componentei F_{11} pe placa supusă unei deformații de 1%.

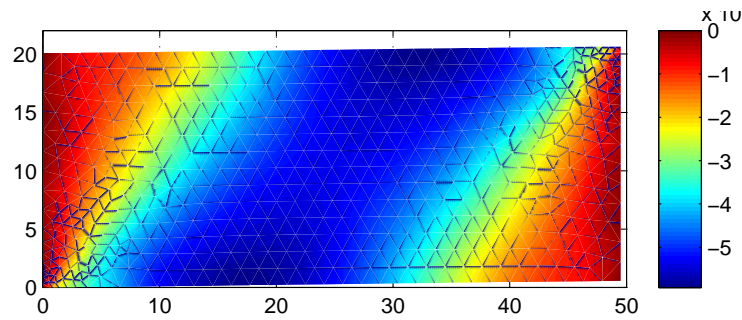
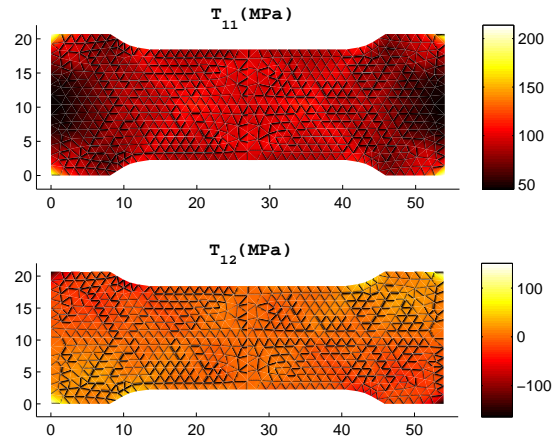


Figura 4.5: Distribuția componentei F_{12} pe placa supusă unei deformații de 1%.

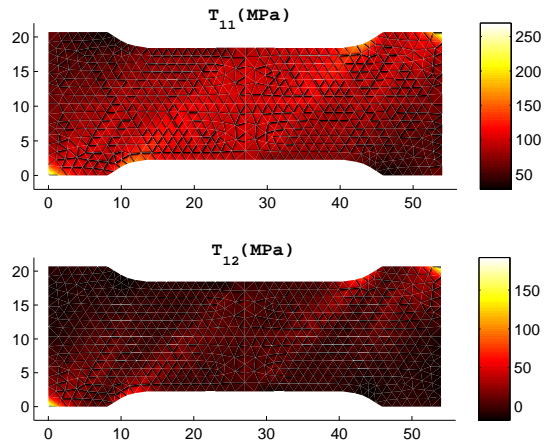
b. **Cazul sistemelor de alunecare:** (\bar{s}^8, \bar{m}^8) și $(\bar{s}^{10}, \bar{m}^{10})$

Distribuția densității de dislocații la diferite stadii ale procesului de deformare (Figura 4.7(b)), precum și a forfecării plastice acumulate și a tensiunii reduse de forfecare (Figura 4.8(b)) prezintă o schemă de curgere localizată în mod pronunțat, de forma unei benzi de forfecare late, care ocupă zona centrală. Componentele tensiunii sunt prezentate în Figura 4.6(b).

Figura 4.6(a) reprezintă distribuția în placă a componentelor tensiunii Cauchy T_{11} și T_{12} , pentru deformații totale de 0.00046, respectiv 0.01, care corespund unei deformări pur elastice, respectiv unei deformări plastice a plăcii. Figurile 4.7(a) și 4.8(a) caracterizează variația densității de dislocație ρ^1 în zonele deformate plastic la diferite stadii de deformare și, respectiv, forfecarea plastică acumulată, densitatea de dislocție și tensiunea redusă pentru deformația totală de 0.01.

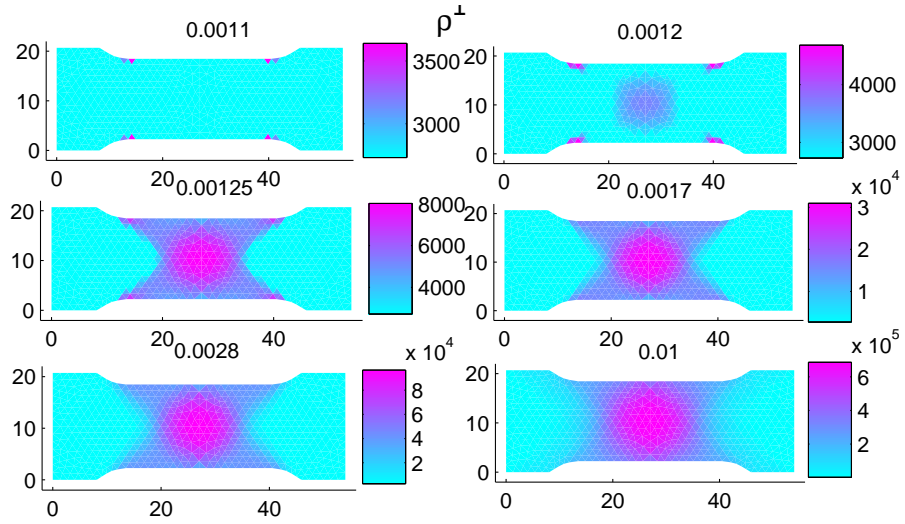


(a)

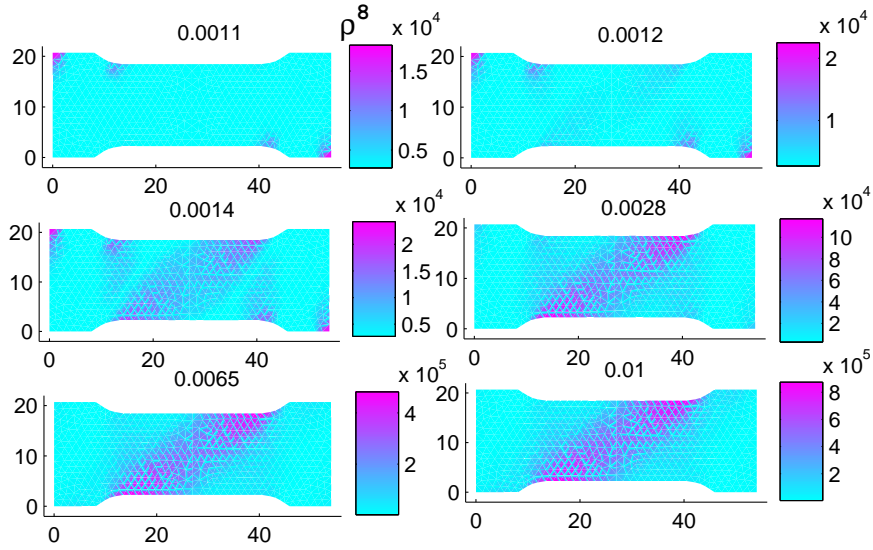


(b)

Figura 4.6: Distribuția componentei tensiunii Cauchy T_{11} și T_{12} în placă, pentru deformația totală de 0.01, pentru sistemele de alunecare (a) $\{(\bar{\mathbf{s}}^1, \bar{\mathbf{m}}^1), (\bar{\mathbf{s}}^7, \bar{\mathbf{m}}^7)\}$, și respectiv $\{(\bar{\mathbf{s}}^8, \bar{\mathbf{m}}^8), (\bar{\mathbf{s}}^{10}, \bar{\mathbf{m}}^{10})\}$.

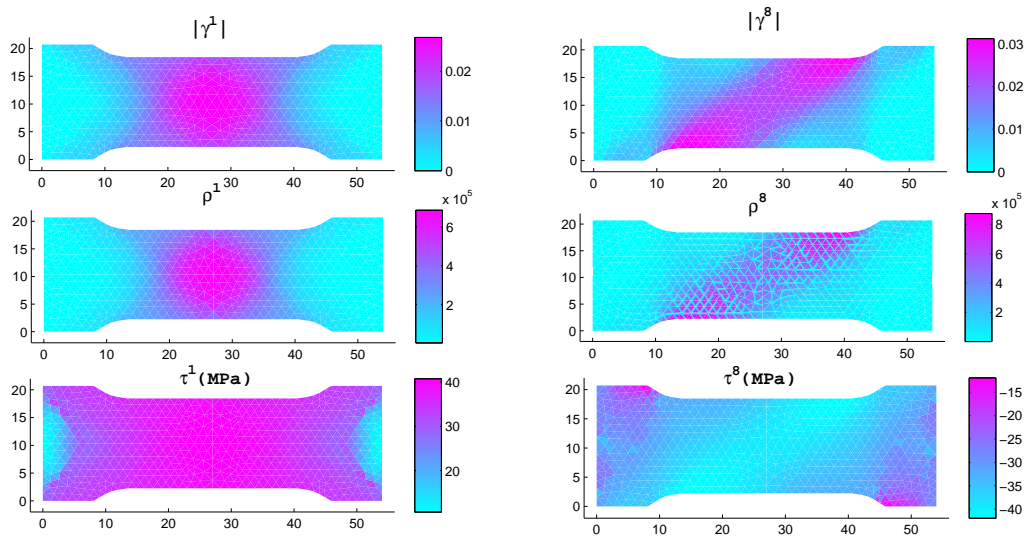


(a)



(b)

Figura 4.7: Distribuția densității de dislații (a) ρ^1 și (b) ρ^8 în placă pentru diferite etape ale activării zonelor plastice, pentru sistemele de alunecare $\{(\bar{s}^1, \bar{m}^1), (\bar{s}^7, \bar{m}^7)\}$, și respectiv $\{(\bar{s}^8, \bar{m}^8), (\bar{s}^{10}, \bar{m}^{10})\}$.



(a)

(b)

Figura 4.8: Distribuții ale forfecării plastice acumulate, distribuția densității de dislocații și a tensiunii reduse de forfecare, la o deformare totală de 0.01 în problema tracțiunii, pentru sistemele de alunecare (a) $\{(\bar{\mathbf{s}}^1, \bar{\mathbf{m}}^1), (\bar{\mathbf{s}}^7, \bar{\mathbf{m}}^7)\}$, și respectiv (b) $\{(\bar{\mathbf{s}}^8, \bar{\mathbf{m}}^8), (\bar{\mathbf{s}}^{10}, \bar{\mathbf{m}}^{10})\}$.

Concluzii și cercetări de perspectivă

În concluzie teza poate fi sintetizată după cum urmează:

- S-a creat cadrul constitutiv pentru modelarea materialelor elasto-vâscoplastice cu defecte microstructurale de tip dislocații. Acest model se bazează pe teorii ale plasticității de ordinul doi;
- A fost elaborată o metodologie de abordare a problemelor cu date inițiale și pe frontieră prin formulare variațională cuplată cu ecuații constitutive în viteze (incrementale);
- În acest cadru constitutiv s-au dedus ecuațiile de evoluție de tip nelocal pentru densitățile de dislocație, precum și forma contra-tensiunii;
- Se precizează ca un caz particular, un cadru constitutiv clasic, cu densități de dislocație locale și nelocale.
- S-a prezentat formularea variațională a ecuației de echilibru incrementală cuplată cu sistemul complet de ecuații de evoluție a câmpurilor necunoscute;
- S-a propus un algoritm complet utilizând metoda elementului finit pentru modelarea ecuației variaționale, cuplat cu schema de actualizare a datelor prin metoda Euler explicit, bazat pe descrierea relativă pentru cazul tridimensional și respectiv bidimensional (stare plană de tensiune). Suplimentar, s-a creat o subrutină care rezolvă numeric prin MEF ecuația de tip nelocal a densității de dislocație și s-a încorporat în algoritmul de actualizare.
- Algoritmii au fost implementați numeric pentru probleme de tracțiune și compresiune, în care au fost considerate diferite sisteme de alunecare, cu luarea în considerație a condiției de alunecare.

- S-a studiat influența neomogenităților inițiale ale densităților de dislocații asupra comportamentului elasto-plastic al materialului.

Algoritmul propus în această lucrare nu conține incrementi $\Delta \mathbf{S}$ în timp a tensorului de tensiune Piola - Kirchhoff de ordinul întâi \mathbf{S} ca în Teodosiu et al. [1993], astfel, nu este nevoie de calculul incrementilor $\Delta \gamma^\alpha$ pentru alunecare plastică γ^α . Se evită astfel, calculul laborios de rezolvare la fiecare moment de timp, în fiecare nod, a sistemului liniar de ecuații, ale cărui necunoscute intervin în calculul incrementilor $\Delta \gamma^\alpha$ (vezi lucrările Dao și Asaro [1996a]).

În modelul considerat în lucrarea de față s-a luat în calcul răspunsul elastic al materialului, spre deosebire de exemplu de lucrările Teodosiu et al. [1993], Cazacu și Ionescu [2010] în care distorsiunea elastică este redusă la o rotație, presupunându-se că deformația elastică este neglijabilă în raport cu deformația plastică.

Având ca fundament cadrul constitutiv prezentat în lucrarea de față se deschid o multitudine de probleme. Ca perspectivă este necesară îmbunătățirea algoritmului numeric și compararea lui cu alți algoritmi, dați de exemplu în Teodosiu et al. [1993] sau Dao și Asaro [1996a]. Se deschid noi direcții de cercetare pe această temă printre care sunt următoarele:

- Modelarea numerică a modelelor cu dislocații tensoriale, prezente prin densitatea de dislocație a lui Noll, sau (GND);
- Studiul influenței orientării inițiale a sistemelor cristalografice față de planul plăcii;
- Studiul matematic: unicitate, existența, dependența continuă de date.

Bibliografie

- R.J. Asaro și J.R. Rice. Strain localization in ductile single crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 25:309–338, 1977.
- B. A. Bilby. Continuous distribution of dislocations. În Sneddon și R Hill, editori, *Progress in Solid Mechanics*, pp. 329–398, North-Holland, Amsterdam, 1960.
- L. Bortoloni și P. Cermelli. Dislocation patterns and work-hardening in crystalline plasticity. *Journal of Elasticity*, 76:113–138, 2004.
- E.P. Busso și G. Cailletaud. On the selection of active slip systems in crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*, 21:2212–2231, 2005.
- O. Cazacu și I. R. Ionescu. Dynamic crystal plasticity: An eulerian approach. *Journal of The Mechanics and Physics of Solids*, 58:844–859, 2010.
- Y.W. Chang și R.J. Asaro. An experimental study of shear localization in aluminum-copper single crystals. *Acta Metallurgica*, 29:241–257, 1981.
- J.D. Clayton, D.J. Bammann și D.L. McDowell. Anholonomic configuration spaces and metric tensors in finite elasto-plasticity. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 39:1039–1049, 2004.
- S. Cleja-Țigoiu. Large elasto-plastic deformations for materials with relaxed configurations: I. constitutive assumptions; ii. role of the complementary plastic factor. *International Journal of Engineering Science*, 28:171–191, 273–284, 1990.
- S. Cleja-Țigoiu. Anisotropic and dissipative finite elasto-plasticity. În *Rendiconti del Seminario Matematico dell’Universita et Politecnico di Torino*, volumul 58, pp. 69–82, 2000.
- S. Cleja-Țigoiu. Couple stresses and non-riemannian plastic connection in finite elasto-plasticity. *The Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, 53: 996–1013, 2002.

-
- S. Cleja-Țigoiu. Material forces in finite elasto-plasticity with continuously distributed dislocations. *International Journal of Fracture*, 147:67–81, 2007.
- S. Cleja-Țigoiu. Elasto-plastic materials with lattice defects modeled by second order deformations with non-zero curvature. *International Journal of Fracture*, 166:61–75, 2010.
- S. Cleja-Țigoiu. Non-local elasto-viscoplastic with lattice defects modeled by second order deformations with non-zero curvature. *Recent Progress in the Mathematics of Defects*, pp. 61–75, 2011.
- S. Cleja-Țigoiu. Non-local elasto-viscoplastic models with dislocations in finite elasto-plasticity. part I: Constitutive framework. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 18(4):349–372, 2013.
- S. Cleja-Țigoiu și V. Țigoiu. Strain gradient effect in finite elasto-plastic damaged materials. *International Journal of Damage Mechanics*, 20:484–514, 2011.
- S. Cleja-Țigoiu și A. Matei. Rate boundary value problems and variational inequalities in rate-independent finite elasto-plasticity. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 17(6):557–586, 2012.
- S. Cleja-Țigoiu și R. Pașcan. Influence of dislocations on the deformability of metallic sheets. În *16-th ESAFORM Conference on Material Forming. Trans Tech Periodicals published by Trans Tech Publications Ltd, Kreuzstrasse 10, CH-8635 Zurich-Durnten, Switzerland, in Aveiro, Portugal*, volumul 554–557, pp. 99–109, 2013a.
- S. Cleja-Țigoiu și R. Pașcan. Non-local elasto-viscoplastic models with dislocations in finite elasto-plasticity. part II: Influence of dislocations in crystal plasticity. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 18(4):373–396, 2013b.
- S. Cleja-Țigoiu și R. Pașcan. Non-local models with dislocations and non-Schmid effect. În X. Lu și A. Miranville, editori, *Discrete and Continuous Dynamical Systems*, volumul 6, pp. 1937–1632. American Institute of Mathematical Sciences, 2013c. Issue on the Tenth Edition of the French-Romanian Conference on Applied Mathematics.
- S. Cleja-Țigoiu și R. Pașcan. Slip systems and flow patterns in viscoplastic metallic sheets with dislocations. *Int J Plast*, 2013, trimis spre publicare.
- S. Cleja-Țigoiu, R. Pașcan și N. Stoicuță. Numerical approach to some problems in elasto-plasticity. În L. Marin, L. Munteanu și V. Chiroiu, editori, *Inverse problems and computational mechanics*, capitolul 3, pp. 53–82. Ed. Academiei Române, 2011.

-
- G. Dahlquist și A. Björk. *Numerical Methods in Scientific Computing, Volume I*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2008.
- M. Dao și R.J. Asaro. Localized deformation modes and non-schmid effects in crystalline solids. part I. critical conditions of localization. *Mechanics of Materials*, 23:71–102, 1996a.
- M. Dao și R.J. Asaro. Localized deformation modes and non-schmid effects in crystalline solids. part II. deformation patterns. *Mechanics of Materials*, 23:103–132, 1996b.
- R. A. de Wit. A view of the relation between the continuum theory of lattice defects and non-euclidean geometry in the linear approximation. *Int J Engng Sci*, 19:1025–1039, 1981.
- M. Epstein. *The Geometrical Language of Continuum Mechanics*. Cambridge, 2010.
- J. Fish și T. Belytschko. *A First Course in Finite Elements*. John Wiley and Sons, New York, 2007.
- M. Fivel și S. Forest. Plasticité cristalline et transition d'échelle : cas du monocristal. *Techniques de l'ingénieur*, 2004.
- N.A. Fleck, G.M. Muller, M.F. Ashby și J.W. Hutchinson. Strain gradient plasticity: theory and experiment. *Acta Metallurgica et Materialia*, 42:475–487, 1994.
- I. Gavrilescu și C. Mocanu. *Analiză cu elemente finite*. Editura fundației universitare 'Dunărea de jos', 1999.
- P. Grudmundson. A unified treatment of strain gradient plasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, pp. 1379–1406, 2004.
- M. E. Gurtin. On the plasticity of single crystals: Free energy, microforces, plastic-strain gradients. *Journal of Mechanics and Physics of Solids*, 48:989–1036, 2000.
- M. E. Gurtin. A gradient theory of single-crystal viscoplasticity that accounts for geometrically necessary dislocations. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 50:5–32, 2002.
- M. E. Gurtin și L. Anand. The decomposition $\mathbf{f} = \mathbf{f}^e \mathbf{f}^p$, material symmetry, and plastic irrotationality for solids that are isotropic-viscoplastic or amorphous. *International Journal of Plasticity*, 21:1686–1719, 2005.
- M. E. Gurtin și A. Needleman. Boundary conditions in small-deformation, single-crystal plasticity that account for the burgers vector. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 53:1–31, 2005.

-
- T.J.R. Hughes. *The Finite Element Method. Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey 07632, 1987.
- C. Johnson. *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- K. Kondo și M. Yuki. On the current viewpoints of non-Riemannian plasticity theory. În *In RAAG Memoirs of the Unifying Study of Basic Problems in Engineering and Physical Sciences by Means of Geometry*, volumul II (D), pp. 202–226, 1958.
- E. Kröner. The differential geometry of elementary point and line defects in bravais crystals. *International Journal of Theoretical Physics*, 29:1219–1237, 1990.
- E. Kröner. The internal mechanical state of solids with defects. *International Journal of Solids and Structures*, 29:1849–1857, 1992.
- M. Kuroda. Crystal plasticity model accounting for pressure dependence of yielding and plastic expansion. *Scripta Materialia*, 48:605–610, 2003.
- M. Kuroda. On large-strain finite element solutions of higher-order gradient crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 48:3382–3394, 2011.
- M. Kuroda și V. Tvergaard. A finite deformation theory of higher-order gradient crystal plasticity. *International Journal of Solids and Structures*, 56:2573–2584, 2008.
- K.C. Le și H. Stumpf. A model of elastoplastic bodies with continuously distributed dislocations. *International Journal of Plasticity*, 12:611– 627, 1996.
- J.E. Marsden și T.J.R. Hughes. *Mathematical Foundations of Elasticity*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1983.
- A. Menzel și P. Steinmann. On the continuum formulation of higher gradient plasticity for single and polycrystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48:1777–1796, 2000.
- S. Nemat-Nasser și T Okinaka. A new computational approach to crystal plasticity: fcc single crystal. *Mechanics of Materials*, 24(1):43–57, 1996.
- W. Noll. Materially uniform simple bodies with inhomogeneities. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 27:1–32, 1967.
- W. Noll. *The foundations of mechanics and thermodynamics, Selected papers*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1974.

-
- M. Schmidt-Baldassari. Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 192(11-12): 1261–1280, 2003.
- J.A. Schouten. *Ricci-Calculus*. Springer-Verlag/ Berlin. Gottingn. Heidelberg, 1954.
- L.J. Segerlind. *Applied Finite Element Analysis*. John Wiley and Sons, New York, 1984.
- P. Steinmann. Views on multiplicative elastoplasticity and continuum theory of dislocations. *International Journal of Engineering Science*, 34:1717–1735, 1996.
- C. Teodosiu. A dynamic theory of dislocations and its applications to the theory of the elastic- plastic continuum. În J. A. Simmons, R. de Witt și R. Bullough, editori, *Fundamental Aspects of Dislocation Theory*, pp. 837 – 876, Nat. Bur. Stand. (U.S.), Spec. Publ. 317, II, 1970.
- C. Teodosiu. *Elastic Models of Cristal Defects*. Editura Academiei București, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1982.
- C. Teodosiu și F. Sidoroff. A physical theory of finite elasto-viscoplastic behaviour of single crystal. *International Journal of Engineering Science*, 14:165–176, 1976.
- C. Teodosiu și E. Soós. *Calcul tensorial cu aplicații în mecanica solidelor*. Editura științifică și enciclopedică, București, 1983.
- C. Teodosiu, J.L. Raphanel și L. Tabourot. Finite element simulation of the large elastoplastic deformation of multicrystals. În C. Teodosiu, J. L. Raphanel, F. Sidoroff și A. A. Balkema, editori, *Large Plastic Deformations, Fundamental Aspects and Applications to Metal Forming*, pp. 153–168, Brookfiels, Rotterdam, 1993.
- C. Truesdell și W. Noll. *The Non-Linear Field Theories of Mechanics*. Springer, Berlin Heidelberg New York, 2004.
- C.C. Wang. Inhomogeneities in second-grade fluid bodies and isotropic solid bodies. *Archives of Mechanics*, 25:765–780, 1973.