

**СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

---

P17-85-886

И. Дёрфель

**ОСНОВЫ ПРОГРАММИРОВАНИЯ  
ДЛЯ СИМУЛИРОВАНИЯ ТЕКСТУРЫ  
КУБИЧЕСКИХ ОБЪЕМНО-ЦЕНТРИРОВАННЫХ  
МЕТАЛЛОВ  
МЕТОДОМ ТЕЙЛОРА**

---

**1985**

---

## ВВЕДЕНИЕ

В этой работе излагаются основные положения, используемые для программирования теоретической симуляции образования текстур при пластической деформации согласно теории Тейлора.

В качестве примера рассмотрена прокатка кубического объемно-центрированного /ОЦК/ поликристалла, состоящего из случайно распределенных кристаллитов. Ориентации кристаллитов относительно образца должны быть представлены в виде стереографических проекций, т.е. в специальной, обратной полюсной фигуре /см. рис.1/.

Системы координат и углы Эйлера выбраны таким образом, что преобразование координат из системы образца в систему кристаллита производится при помощи матрицы  $O$  :

$$O = \begin{pmatrix} \cos\phi_1 \cos\phi_2 - \sin\phi_1 \sin\phi_2 \cos\varphi & \sin\phi_1 \cos\phi_2 + \cos\phi_1 \sin\phi_2 \cos\varphi & \sin\phi_2 \sin\varphi \\ -\cos\phi_1 \sin\phi_2 - \sin\phi_1 \cos\phi_2 \cos\varphi & -\sin\phi_1 \sin\phi_2 + \cos\phi_1 \cos\phi_2 \cos\varphi & \cos\phi_2 \sin\varphi \\ \sin\phi_1 \sin\varphi & -\cos\phi_1 \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \quad /1/$$

согласно формуле для тензоров второго ранга

$$T^c = O \cdot T^s \cdot O^{-1} \quad /2/$$

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

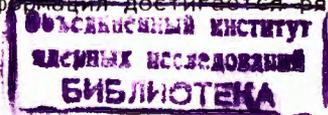
В системе образца ось  $z$  соответствует направлению прокатки, ось  $y$  - поперечному направлению, и ось  $x$  - направлению нормали к плоскости прокатки. Для прокатки было принято простое, плоское состояние напряжения. Тогда тензор деформации в системе образца равен

$$T^s = \begin{pmatrix} -\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \epsilon \end{pmatrix} \quad /3/$$

Обратная полюсная фигура направления прокатки описывает относительную вероятность совпадения разных направлений кристаллита с направлением прокатки.

Для указания величины угла  $\phi_1$  используем прием, предложенный Ван-Хутте и Эрнуо /1/. При этом каждая точка получает дополнительную характеристику /см.рис.3/.

Модель Тейлора справедлива только для достаточно малых деформаций. Конечная деформация достигается рядом малых дефор-



маций, выполненных друг за другом. При этом конечные ориентировки кристаллитов одного шага являются исходными ориентировками для следующего шага. Для симуляции деформации поликристалла целесообразно начать с исходного состояния материала без текстуры /кристаллиты ориентированы равномерно/. Достаточно рассмотреть только часть пространства углов Эйлера, соответствующую симметрии кристалла и образца <sup>1,2/</sup>. Для нашего случая эта фундаментальная область в стереографической проекции имеет вид треугольника [001], [011], [111] /см.рис.1а/. Чем плотнее сетка точек при расчетах, тем лучше можно предсказать возникающую текстуру и способ движения отдельных зерен.

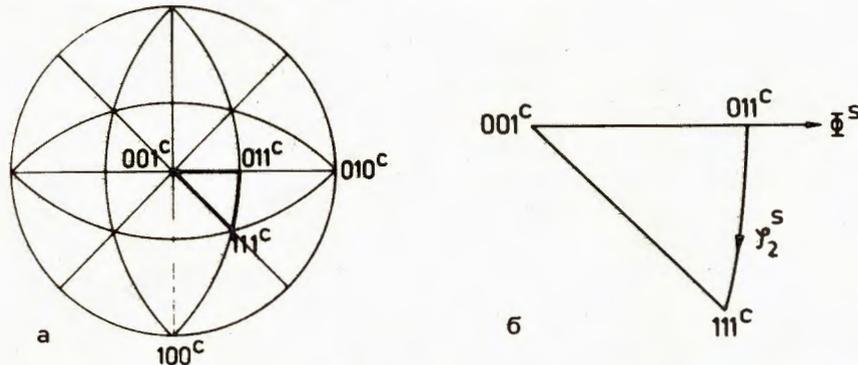


Рис.1.а - фундаментальная область для кубической симметрии кристалла и орторомбической симметрии образца; б - обратная полюсная фигура в направлении прокатки и распределения углов Эйлера отдельных ориентировок.

Согласно <sup>1/</sup>, для нашего случая 147 ориентировок приводит к вполне разумным результатам. При выборе этих ориентировок надо принимать во внимание, что плотность в пространстве углов Эйлера не постоянна. Существует инвариантная мера

$$I(\phi_1, \phi, \phi_2) = \sin \phi \, d\phi_1 \, d\phi \, d\phi_2, \quad /4/$$

с учетом которой выбираются углы /см. рис.3/. Текстура образуется путем скольжения дислокаций в определенных системах скольжения. За этим следует вращение решетки, и отдельные кристаллиты занимают преимущественные ориентировки. Образуется текстура. Системы скольжения в ОЦК-структуре  $\{110\} \langle 111 \rangle$  и  $\{112\} \langle 111 \rangle$  <sup>4/</sup>.

#### СИМУЛЯЦИЯ

Поскольку модель принимает во внимание инфинитезимальные шаги деформации, рассматривается только скольжение внутри зе-

рен. Скольжением на границах зерен пренебрегается. Мы также не принимаем во внимание двойникование. Этот вид деформации в ОЦК-кристаллах встречается очень редко и возникает только при температурах деформации, близких к 77 К. Здесь рассматривается деформация холодной прокатки, которая происходит при комнатной температуре.

При формулировке задачи о деформации ОЦК-кристалла принято различать 3 случая: действие систем  $\{110\} \langle 111 \rangle$  отдельно; действие систем  $\{112\} \langle 111 \rangle$  отдельно, и действие обеих систем вместе.

Ф.Мизес <sup>5/</sup> доказал, что при одновременном действии пяти систем скольжения можно получить любую деформацию. Таким образом, для каждой ориентировки кристаллитов следует выбрать 5 систем скольжения из всех возможных. В случаях 1 и 2 существуют  $\binom{12}{5}$  возможностей выбора. В случае 3  $\binom{24}{5}$  возможностей.

Выбор между ними осуществляется путем минимизации фактора Тейлора М

$$M = \sum_{i=1}^5 r_c |\gamma_i| = \text{Minimum}, \quad /5/$$

где  $r_c = 1$  - критическое сдвиговое напряжение для системы скольжения.

Сумма модулей скольжения  $\gamma_i$  в отдельных системах достигается путем решения системы линейных уравнений, коэффициенты которых определяет симметричная часть тензора направляющих косинусов систем скольжения  $S_{ijk}^a$

$$S_{ijk}^a = \frac{1}{2} (d_i^k n_j^k + n_j^k d_i^k), \quad /6/$$

где d - направление скольжения; n - направление нормали к плоскости скольжения; k - номер системы скольжения. Правыми частями этих уравнений являются элементы тензора деформации в системе кристалла. Они выражаются следующим образом:

$$\begin{aligned} t_{11}^c &= \epsilon [(-\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi)^2 + \sin^2 \phi_2 \sin^2 \phi], \\ t_{12}^c &= \epsilon [(\cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi)(\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi) + \\ &\quad + \cos \phi_2 \sin^2 \phi \sin \phi_2], \\ t_{13}^c &= \epsilon [(-\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi) \sin \phi_2 \sin \phi + \sin \phi_2 \sin \phi \cos \phi], \quad /7/ \\ t_{21}^c &= \epsilon [(\cos \phi_1 \cos \phi_2 - \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi)(\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi) + \\ &\quad + \cos \phi_2 \sin^2 \phi \sin \phi_2], \\ t_{22}^c &= -\epsilon [(\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi)^2 + \cos^2 \phi_2 \sin^2 \phi], \\ t_{23}^c &= \epsilon [(\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi) \sin \phi_2 \sin \phi + \cos \phi_2 \sin \phi \cos \phi], \\ t_{31}^c &= \epsilon [(-\cos \phi_1 \cos \phi_2 + \sin \phi_1 \sin \phi_2 \cos \phi) \sin \phi_2 \sin \phi + \sin \phi_2 \sin \phi \cos \phi], \\ t_{32}^c &= \epsilon [(\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi) \sin \phi_2 \sin \phi + \cos \phi_2 \sin \phi \cos \phi], \\ t_{33}^c &= \epsilon [-\sin^2 \phi_1 \sin^2 \phi + \cos^2 \phi]. \end{aligned}$$

Ввиду высокой симметрии ОЦК-решетки существует несколько решений систем линейных уравнений с одинаковым  $M$ .

Можно найти области в стереографической проекции, в которых для каждой ориентировки действует только подмножество из всех возможных систем скольжения. В результате пластической деформации зерна меняют свои ориентации. Эти новые ориентации можно рассчитать при помощи следующих формул:

$$\cos \varphi' = \cos \varphi + \sin \varphi (\epsilon_2 \sin \phi_2 + \epsilon_3 \cos \phi_2), \quad /8/$$

$$\sin \varphi' = \sin \varphi - \cos \varphi (\epsilon_2 \sin \phi_2 + \epsilon_3 \cos \phi_2),$$

$$\cos \phi_1' = \cos \phi_1 - \frac{\sin \phi_1}{\sin \varphi} (\epsilon_2 \cos \phi_2 - \epsilon_3 \sin \phi_2), \quad /9/$$

$$\sin \phi_1' = \sin \phi_1 + \frac{\cos \phi_1}{\sin \varphi} (\epsilon_2 \cos \phi_2 - \epsilon_3 \sin \phi_2),$$

$$\cos \phi_2' = \cos \phi_2 + \epsilon_1 \sin \phi_2 + \epsilon_2 \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin^2 \phi_2 - \epsilon_2 \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \sin \phi_2 \cos \phi_2, \quad /10/$$

$$\sin \phi_2' = \sin \phi_2 - \epsilon_1 \cos \phi_2 - \epsilon_3 \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos \phi_2 + \epsilon_2 \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cos^2 \phi_2.$$

Формулы получаются из

$$O' = (1 + \Omega)^T \cdot O, \quad /11/$$

где  $(1 + \Omega)^T$  описывают вращение решетки кристаллита после деформации;

$$(1 + \Omega)^T = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon_1 & -\epsilon_2 \\ \epsilon_1 & 1 & -\epsilon_3 \\ \epsilon_2 & \epsilon_3 & 1 \end{pmatrix}. \quad /12/$$

Смысл параметров  $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3$  подробно объяснен в работе <sup>/8/</sup>. Они выражаются по формуле

$$\begin{pmatrix} 0 & \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ -\epsilon_1 & 0 & \epsilon_3 \\ -\epsilon_2 & -\epsilon_3 & 0 \end{pmatrix} = \eta \cdot \sum_{k=1}^5 \gamma_k \cdot S_{ij_k}^a, \quad /13/$$

где антисимметричная часть тензора скольжения имеет вид

$$S_{ij_k}^a = \frac{1}{2} (d_i^k n_j^k - d_j^k n_i^k), \quad /14/$$

$\eta$  - степень деформации.

Если для какой-либо ориентировки найдется больше чем одно решение,  $n > 1$ , следует образовать из них простое среднее  $\epsilon_i$ .

### ОБРАБОТКА ДАННЫХ ПОСЛЕ ОДНОГО ШАГА ДЕФОРМАЦИИ

Результирующие ориентировки, возникающие после деформации, могут выйти из фундаментальной области стереографической проекции. В этом случае нужно заменить их эквивалентными ориентировками в фундаментальной области /см. рис.2/.

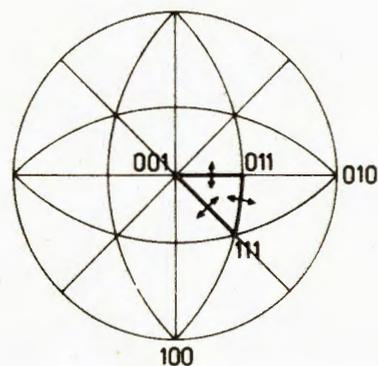


Рис.2. Переходы ориентировок через три вида границ фундаментальной области и замена их эквивалентами.

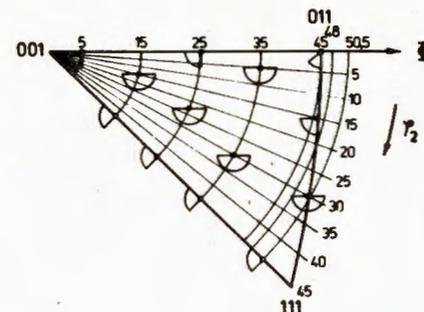


Рис.3. Пример исходных ориентировок в стереографической проекции.

Рассмотрим сначала случай, когда  $\phi_2$  становится отрицательным. Согласно работе Поспиха <sup>/2/</sup>, матрица  $O^E$  эквивалентной ориентировки получается по формуле

$$O^E = g^c \cdot O \cdot g^s, \quad /15/$$

где  $g^c$  и  $g^s$  являются преобразованиями эквивалентности кристалла и образца соответственно. Теперь положим

$$g^c = g^s = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad /16/$$

имеем

$$\phi_2^E = -\phi_2, \quad /17a/$$

$$\phi_1^E = -\phi_1. \quad /17b/$$

Если вместо /16/  $g^B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ , получается /18/

$$\phi_2^E = -\phi_2, \quad /19a/$$

$$\phi_1^E = \pi - \phi_1. \quad /19b/$$

Хорошо видно, что в общем случае для  $\phi_1$  необходимо перекрыть диапазон  $180^\circ$ . Кроме того, для  $\phi_2=0$  ориентировки  $\phi_1$  и  $-\phi_1$  эквивалентны. Следующая возможность пересечения границы фундаментальной области возникает при  $\phi_2 > \frac{\pi}{4}$ .

Тогда

$$g^C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad /20a/$$

и

$$g^B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad /20b/$$

Аналогично имеем

$$\phi_2^E = \frac{\pi}{2} - \phi_2 \quad /21a/$$

и

$$\phi_1^E = -\phi_1. \quad /21b/$$

Видно, что для  $\phi_2 = \frac{\pi}{4}$  эквивалентны ориентировки  $\phi_1$  и  $-\phi_1$ , что приводит, как и в предыдущем случае, к тому, что на границах интервал  $\phi_1$  составляет  $90^\circ$ .

Немного сложнее случай, когда точка переходит третью границу фундаментальной области.

Выбирая

$$g^C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad /22a/$$

и

$$g^B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad /22b/$$

получаем соответствующие соотношения:

$$\phi_1^E = -\arcsin \left[ \frac{\cos \phi_1 \sin \phi_2 + \sin \phi_1 \cos \phi_2 \cos \phi}{\sqrt{1 - \cos^2 \phi_2 \sin^2 \phi}} \right], \quad /23/$$

$$\phi^E = \arccos(\cos \phi_2 \sin \phi), \quad /24/$$

$$\phi_2^E = \arccos \left[ \frac{\cos \phi}{\sqrt{1 - \cos^2 \phi_2 \sin^2 \phi}} \right], \quad /25/$$

$$\phi_2^E = \arcsin \left[ \frac{\sin \phi_2 \sin \phi}{\sqrt{1 - \cos^2 \phi_2 \sin^2 \phi}} \right],$$

где  $\phi_1^E$  - элемент из  $[-90^\circ; +90^\circ]$  и  $\phi^E$  - элемент из  $[0^\circ; 180^\circ]$ . На границе эквивалентны ориентировки  $\phi_1$  и  $(-\phi_1 - \Delta\phi)$ , где

$$\cos \Delta\phi = \cos^2 \phi_2. \quad /26/$$

Согласно этому условию, следует выбрать интервал для  $\phi_1$  от  $-\Delta\phi/2$  до  $-\Delta\phi/2 + \pi/2$ .

Для программирования удобно представлять стереографическую проекцию в декартовых координатах. На оси  $x$  откладывается

$$\frac{t_1}{1 + t_3}, \quad /27/$$

и на оси  $y$

$$\frac{t_2}{1 + t_3}, \quad /28/$$

где

$$t_1 = \sin \phi_2 \sin \phi, \quad /29a/$$

$$t_2 = \cos \phi_2 \sin \phi, \quad /29b/$$

$$t_3 = \cos \phi. \quad /29в/$$

$t_{1,2,3}$  находятся из последнего столбца матрицы  $O$ .

В программе поочередно проверяются условия  $t > 0$ ;

$$t_1 \geq 0; \quad t_2 \geq t_1; \quad t_3 \geq t_2. \quad /30/$$

При невыполнении одного из этих условий производится соответствующая замена углов Эйлера на эквивалентные, согласно разобранным выше случаям.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Ниже представлен перечень исходных данных, необходимых для предсказания возможного типа текстуры в рамках описанного в настоящей работе формализма:

- возможные системы скольжения соответствующей кристаллографической структуры;
- тензор деформации;

- фундаментальная область, соответствующая симметрии кристалла и образца;
- распределение исходных точек симуляции в фундаментальной области.

Если эти данные известны, то можно также симулировать текстуру с другой симметрией материалов и деформацией по формулам, аналогичным приведенным выше. В результате процесса симуляции получается обратная полюсная фигура, где все ориентировки лежат в фундаментальной области и разные точки соответствуют разным ориентировкам, и наоборот. После нескольких шагов должны появляться предпочтительные ориентировки, которые могут быть проверены на эксперименте.

Соответствующая программа симуляции текстур в ближайшее время будет разработана и введена в действие в вычислительном центре Университета им. Гумбольдта в Берлине.

Автор благодарен Ю.М.Останевичу и К.Фельдманну за интерес к работе.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. P.van Houtte, E.Arnoudt. Mat.Sci.Engen., 1976, 23, p.11.
2. J.Pospiech. Cryst.u.Tech., 1972, 7, p.1057.
3. H.-J-Bunge. Texture Analysis in Materials Science, Mathematical Methods, Butterwords 1982.
4. C.M.Van der Walt, Acta Met., 1969, 17, p.393.
5. R.V.Mises. Z.f.angew.Math.u.Mech., 1928, 8, p.11.
6. К.Вальтер, И.Дёрфель. ОИЯИ, P17-84-452, Дубна, 1984.

Рукопись поступила в издательский отдел  
5 декабря 1985 года.

Дёрфель И.

P17-85-886

Основы программирования для симулирования текстуры кубических объемно-центрированных металлов методом Тейлора

Представляется формализм для программирования симуляции возникновения текстур на основе теории Тейлора. Рассматривается случай холодной прокатки ОЦК-поликристалла. Комбинации действующих систем скольжения выбираются на основе критерия Тейлора. Предлагается специальный выбор начальных ориентировок в пространстве углов Эйлера. Найдены формулы для расчета конечных ориентировок.

Аналогичный формализм может быть развит для других видов структур кристалла и деформаций.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод автора

Dörfel J.

P17-85-886

Basis for Programming the Simulation of Texture Formation for BCC Metals in Taylor's Theorie

The formalism for programming a simulation of texture formation on the basis of Taylor's theory is introduced. The case of cold rolling for a bcc polycrystal is considered. A similar formalism for other crystal structures and/or deformations can be analogously worked out.

The investigations has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985