

文章编号:1000-8055(2013)10-2167-07

多晶镍基合金循环塑性细观本构关系

蔚夺魁¹, 杨晓光¹, 张克实²

(1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;

2. 广西大学 土木建筑工程学院, 南宁 530004)

摘 要: 基于晶体塑性的本构理论, 考虑金属材料晶体细观塑性变形流动的各向异性性质及晶体滑移的非线性运动硬化, 以 Voronoi 多晶集合体作为材料的代表性体积单元 (RVE), 用晶体塑性模拟描述 ZSGH4169 多晶镍基合金材料的细观本构关系, 对 ZSGH4169 多晶镍基合金进行了晶粒尺度的对称和非对称循环细观分析. 通过对称循环数值模拟表明: 该模型适合模拟金属材料循环试验中常见的应变硬化现象和 Bauschinger 效应; 通过非对称循环数值模拟表明该模型具有对棘轮效应的描述能力, 计算中发现背应力的演化对滑移切应变率有很大的影响, 滑移切应变率的数值很大程度取决于背应力演化主导的非线性硬化过程.

关 键 词: 循环塑性; 晶体滑移; 各向异性屈服与硬化; Bauschinger 效应; 本构关系

中图分类号: V232.4

文献标志码: A

Mesoscopic mechanical constitutive relation of cyclic plasticity for nickel based polycrystalline superalloy

YU Duo-kui¹, YANG Xiao-guang¹, ZHANG Ke-shi²

(1. School of Energy and Power Engineering,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China;

2. School of Civil and Architecture Engineering,

Guangxi University, Nanning 530004, China)

Abstract: Based on the constitutive relation in crystal plasticity, anisotropy of cyclic hardening of meso-plastic deformation flow and nonlinear movement of crystal slip was considered. Using the Voronoi polycrystalline as a representative volume element (RVE), the mesoscopic mechanical constitutive relation of nickel based polycrystalline superalloy was described by the theory of crystal plasticity. Calculations of both symmetric and asymmetric cycle analyses were conducted. The results of symmetric cyclic analyses indicate that the model is suitable to simulate the strain hardening phenomenon and Bauschinger effect. The results of asymmetric cycle analyses show that the model has the ability to describe ratchet behavior, back stress calculations have great impact on the evolution of slip shear strain rate, slip shear strain rate value largely depends on nonlinear evolution led by back stress hardening process.

Key words: cyclic plasticity; crystal slip; anisotropic yield hardening; Bauschinger effect; constitutive relation

收稿日期: 2012-10-09

网络出版地址:

作者简介: 蔚夺魁 (1968—), 男, 内蒙古凉城人, 研究员, 博士生, 主要从事航空发动机强度设计和试验研究.

镍基高温合金由于其良好的抗疲劳性能和高温持久强度,广泛应用于燃气轮机热端部件,典型的如涡轮盘,其为多晶镍基材料. 这类材料的强度和寿命研究,已从唯像和宏观的角度深入到了微观层次. 特别是寿命问题的研究,多晶材料的晶界,其微观力学行为决定着裂纹起始阶段的特性,对这些特性的了解,有助于发展物理机制更准确的寿命模型.

多晶的高温镍基合金,在微观层次,其微结构是不均匀的,并且由于晶粒力学性质的各向异性、晶粒形状和取向的随机性,其力学性质也是很不均匀的. 在这个尺度下,构成多晶结构的单晶晶粒的各向异性弹性和非弹性性质需要用考虑晶体构造的各向异性弹性和各向异性滑移塑性本构关系来描述. Taylor 和 Elam^[1-3]对晶体滑移与塑性变形的关系做出了开创性的定量研究,证实了滑移的晶体学性质,提出了单晶塑性运动方程,利用晶体学给出了晶体变形的运动学解释. 而后 Hill 和 Rice^[4]的研究奠定了单晶体塑性有限变形的几何学、运动学及本构理论框架,从而可以给出率无关的弹塑性有限元分析方法. 此后, Asaro, Rice, Peirce, Hill, Havner, Nasser, Rashid, Cuitino 等^[5-12]更进一步完善了晶体塑性理论,并应用于率相关的黏塑性有限元分析. Roters 等^[13]给出了晶体塑性发展较为详细的综述. 近年来,张克实、尹泽勇等^[14-15]在前人的基础上,推广了晶体塑性有限元理论在我国的应用.

另一方面,循环载荷下,涡轮局部会进入屈服状态,其力学行为与材料的屈服及后继屈服特性密切相关. 加、卸载过程引起屈服面的不断变化决定了弹塑性分界和塑性流动方向. 因此,屈服面演化的精确预测对于晶体材料在循环塑性载荷下的应力应变分析至关重要. 当前,建立在连续介质力学理论基础上的宏观唯像的黏塑性本构理论既不考虑材料自身的多晶结构,也不考虑细观尺度下材料塑性滑移的变形模式,能给出零件或结构的宏观力学行为的合理描述,获得材料或结构的整体响应一般来说是有效的,但对材料或结构的局部行为,如损伤、破坏,以及材料细观尺度下的力学性质与材料宏观力学行为之间的关系等分析结果就不一定合理,甚至无法得到结果. 因此,在晶粒尺度下,研究涡轮盘用镍基高温合金在各向异性环境下的塑性变形及由塑性滑移造成的微结构演化具有十分重要的理论和工程意义.

出于这一目的,本文基于晶体塑性理论探讨

适合多晶镍基合金循环塑性的细观本构模型,研究了采用 Chaboche 对材料非线性运动硬化描述的晶体塑性本构理论,并和有限元方面结合,给出了本构的积分算法;最后针对典型的涡轮盘材料 GH4169,用 Voronoi 多晶集合作为多晶材料代表性体积单元的计算方法,计算循环载荷下的循环变形行为,验证了方法的能力.

1 晶体塑性本构关系计算方法

1.1 考虑 Bauschinger 效应的晶体黏塑性率形式本构关系

Hutchinson^[16]建议用黏塑性关系来描述晶体物质点的第 α 滑移系上的分解切应力 $\tau^{(\alpha)}$ 与分解切应变率 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 之间的关系

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^k \tag{1}$$

$\dot{\gamma}_0$ 为参考切应变率,是待定材料常数; k 是反映材料的率敏感性质的材料常数;而 $g^{(\alpha)}$ 是第 α 滑移系的非弹性滑移硬化函数. 由于上述关系不能反映 Bauschinger 效应,可以采用一种考虑晶体滑移机制、能描述细观尺度下多晶材料循环塑性特点的本构模型,该模型将 Chaboche^[17] 建议的对材料非线性运动硬化的描述用于晶体塑性变形的滑移硬化描述,从而将反映非线性运动硬化规律的单晶体黏塑性演化律写为

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)} - x^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)} - x^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^k \tag{2}$$

与式(1)相比,增加的 $x^{(\alpha)}$ 是背应力,它反映 α 滑移系启动范围的移动(类似于 Chaboche^[17] 模型用各向同性材料的屈服面中心移动来描述屈服范围变化). 而背应力 $x^{(\alpha)}$ 的演化由下式描述^[15]:

$$\dot{x}^{(\alpha)} = a\dot{\gamma}^{(\alpha)} - cx^{(\alpha)}|\dot{\gamma}^{(\alpha)}| - qx^{(\alpha)} \tag{3}$$

式中 a, c, q 是材料常数. 式(3)中右端第 1 项表示线性硬化,第 2 项和第 3 项的引入反映了 α 滑移系的非线性硬化,分别为动态恢复项和静态恢复项. 引入背应力除了可以解释滑移硬化和 nonlinear 硬化现象以外,还能对近似于率无关的材料的松弛现象和蠕变恢复现象给出合理的解释.

1.2 晶粒的晶体增量应变计算

为进行有限元计算,需要将前面关于率形式的晶体非弹性本构关系转换为增量形式的公式. 从增量步初始 t 时刻到增量步末 $t + \Delta t$ 时刻,相应的增量对数应变张量 $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}$ 由下式计算:

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{i=1}^3 \ln(\Delta \lambda_i) \boldsymbol{n}_i \boldsymbol{n}_i = \int_t^{t+\Delta t} \boldsymbol{D} \mathrm{d} \tau \tag{4}$$

式中 $\Delta\lambda_i$ 是增量变形张量的主值, $\mathbf{n}_i$ 是 $t + \Delta t$ 时刻当前主伸长 λ_i 的方向矢量, $\mathbf{D}$ 是 Euler 变形率 (伸长率) 张量。

利用 Euler 速率梯度张量的和分解, 可以将应变增量张量分解为增量弹性应变和增量塑性应变

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon} = \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^e + \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^p \quad (5)$$

根据晶体的变形几何分析, 在卸载状态有

$$\mathbf{F}^p = \mathbf{I} + \sum_{\alpha=1}^n \gamma^{(\alpha)} \mathbf{m}^{(\alpha)} \mathbf{n}^{(\alpha)} \quad (6)$$

式中 $\gamma^{(\alpha)}$ 是第 α 滑移系的切应变, $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 和 $\mathbf{n}^{(\alpha)}$ 分别表示第 α 滑移系滑移方向的单位向量和滑移面的单位法向量, n 是晶体滑移系的数目。卸载状态下, Euler 速率梯度张量的塑性部分是 $\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}$, 由变形运动分析可以表达为

$$\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{m}^{(\alpha)} \mathbf{n}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (7)$$

对卸载状态的物质点恢复周围约束, 即 $\mathbf{L}^p$ 由 $\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1}$ 恢复为 $\mathbf{F}^* \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{*-1}$, 导致晶格恢复卸载前的弹性变形和旋转, 该物质点的滑移方向矢量 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 和滑移面的法向矢量 $\mathbf{n}^{(\alpha)}$ 都会改变。这时 α 滑移系的滑移方向变为 $\mathbf{m}^{(\alpha)*}$, 法向矢量变为 $\mathbf{n}^{(\alpha)*}$, 分别表示为

$$\mathbf{m}^{(\alpha)*} = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{n}^{(\alpha)*} = \mathbf{n}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{*-1} \quad (8)$$

$\mathbf{L}^p$ 可以写为

$$\mathbf{L}^p = \mathbf{F}^* \cdot \left(\sum_{\alpha=1}^n \mathbf{m}^{(\alpha)} \mathbf{n}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \cdot \mathbf{F}^{*-1} = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{m}^{(\alpha)*} \mathbf{n}^{(\alpha)*} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$$

从而有

$$\mathbf{D}^p = \frac{1}{2} (\mathbf{L}^p + \mathbf{L}^{pT}) = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)*} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (9)$$

式中

$$\mathbf{P}^{(\alpha)*} = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^{(\alpha)*} \mathbf{n}^{(\alpha)*} + \mathbf{n}^{(\alpha)*} \mathbf{m}^{(\alpha)*}) \quad (10)$$

具有对称性, 与 $\mathbf{P}^{(\alpha)*}$ 相对应的反对称部分是

$$\mathbf{W}^{(\alpha)*} = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^{(\alpha)*} \mathbf{n}^{(\alpha)*} - \mathbf{n}^{(\alpha)*} \mathbf{m}^{(\alpha)*}) \quad (11)$$

$\mathbf{P}^{(\alpha)*}$ 和 $\mathbf{W}^{(\alpha)*}$ 反映物质点晶格取向及其变化, 其中 $\mathbf{W}^{(\alpha)*}$ 可以用于确定晶格旋转的计算。增量塑性应变 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^p$ 的计算公式

$$\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^p = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)*} \Delta\gamma^{(\alpha)} \quad (12)$$

在增量计算中, 要不断更新 $\mathbf{P}^{(\alpha)*}$ 和 $\mathbf{W}^{(\alpha)*}$, 以跟踪晶格的畸变和旋转。对每个增量步, 相应于当前构形的增量对数应变 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}$ 可视为已知, 因此若

解得增量塑性应变 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^p$ 就能由式 (5) 计算增量弹性应变 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^e$ 。而式 (12) 中当前增量步的分解切应变增量可通过增量步初 t 时刻和增量步末 $t + \Delta t$ 时刻的分解切应变率的线性组合计算得到

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = [(1 - \eta)^t \dot{\gamma}^{(\alpha)} + \eta^{t+\Delta t} \dot{\gamma}^{(\alpha)}] \Delta t \quad (13)$$

式中 $0 < \eta \leq 1$ 是常量; $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 和 ${}^{t+\Delta t} \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 分别是滑移系 α 分解切应变率增量步初的已知值和增量步末的待求值。

1.3 晶粒的晶体本构关系计算及晶格旋转的估计

Kirchhoff 应力张量的 Jaumann 率是扣除了刚体旋转的应力率, 其公式可写为

$$\frac{d^{\nabla J}}{dt} (J\boldsymbol{\sigma}) = \frac{d}{dt} (J\boldsymbol{\sigma}) - J(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}) \quad (14)$$

式中 $\frac{d^{\nabla J}}{dt}(\quad)$ 表示对 $(\quad)$ 求 Jaumann 率, J 是从参考构形到当前构形的体积变化, $J\boldsymbol{\sigma}$ 是 Kirchhoff 应力张量, $\boldsymbol{\Omega}$ 是 Euler 旋率张量。将其改写为增量形式, 设时间间隔是 t 时刻到 $t + \Delta t$ 时刻, 并取当前构形为参照构形, 则

$$\Delta\boldsymbol{\sigma}^{\nabla J} = {}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma} - {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t - \boldsymbol{\Omega} \cdot {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t + {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (15)$$

式中 ${}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma}$ 是以 $t + \Delta t$ 时刻构形为参照构形的当前时刻的 Cauchy 应力张量; ${}^t \boldsymbol{\sigma} |_t$ 是以 t 时刻构形为参照构形的 t 时刻物质点的 Cauchy 应力张量; $\boldsymbol{\Omega} \cdot {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t - {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t \cdot \boldsymbol{\Omega}$ 是 ${}^t \boldsymbol{\sigma}$ 从以 t 时刻构形为参照构形改为以 $t + \Delta t$ 时刻构形为参照构形发生的变化。因此, ${}^t \boldsymbol{\sigma} |_t + \boldsymbol{\Omega} \cdot {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t - {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t \cdot \boldsymbol{\Omega}$ 就是 t 时刻物质点的 Cauchy 应力张量在当前构形下的表达, 即

$${}^t \boldsymbol{\sigma} = {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t + \boldsymbol{\Omega} \cdot {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t - {}^t \boldsymbol{\sigma} |_t \cdot \boldsymbol{\Omega} \quad (16)$$

于是在整体坐标系下可以将式 (15) 改写为

$${}^{t+\Delta t} \boldsymbol{\sigma} = {}^t \boldsymbol{\sigma} + \Delta\boldsymbol{\sigma} = {}^t \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{C} : \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^* \quad (17)$$

式中 ${}^t \boldsymbol{\sigma}$ 在 ABAQUS 软件的 Umat 材料子程序中是已知张量, 而 $\Delta\boldsymbol{\varepsilon}^*$ 需要求出塑性应变增量张量后才能确定, $\mathbf{C}$ 需要按上一增量末的晶格取向来进行方向修正。

将式 (13) 代入式 (12), 有

$$\begin{aligned} \Delta\boldsymbol{\varepsilon}^p &= \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)*} \Delta\gamma^{(\alpha)} = \\ &= (1 - \eta) \Delta t \left(\sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)*} {}^t \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) + \\ &\quad \eta \Delta t \left(\sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)*} {}^{t+\Delta t} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \end{aligned} \quad (18)$$

再代入式(5)和式(17)

$$\begin{aligned} {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma} &= {}^t\boldsymbol{\sigma} + \\ {}^{(4)}\mathbf{C} : &\left[\Delta\boldsymbol{\varepsilon} - (1-\eta)\Delta t \left(\sum_{a=1}^n \mathbf{P}^{(a)*} {}^t\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(a)} \right) + \right. \\ &\left. \eta\Delta t \left(\sum_{a=1}^n \mathbf{P}^{(a)*} {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(a)} \right) \right] \end{aligned} \quad (19)$$

注意到 Cauchy 应力与滑移系分解切应力的关系: $\boldsymbol{\tau}^{(a)} = \mathbf{P}^{(a)*} : \boldsymbol{\sigma}$, 同时利用式(2), 可知

$$\begin{aligned} \sum_{a=1}^n \mathbf{P}^{(a)*} {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(a)} &= \\ \sum_{a=1}^n \mathbf{P}^{(a)*} \dot{\boldsymbol{\gamma}}_0 \operatorname{sgn}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\tau}^{(a)} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{x}^{(a)}) \cdot \\ &\left(\frac{|\mathbf{P}^{(a)*} : {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{x}^{(a)}|}{{}^{t+\Delta t}g^{(a)}} \right)^k \end{aligned} \quad (20)$$

因而利用式(5)、式(17)~式(20)可以得到关于 ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}$ 的非线性方程组:

$${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{r} - \mathbf{H}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}) \quad (21)$$

式中

$$\begin{aligned} \mathbf{r} &= {}^t\boldsymbol{\sigma} + \\ {}^{(4)}\mathbf{C} : &\left[\Delta\boldsymbol{\varepsilon} - (1-\eta)\Delta t \sum_{a=1}^n \mathbf{P}^{(a)*} {}^t\dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(a)} \right] \\ &\mathbf{H}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}) = \end{aligned} \quad (22)$$

$$\eta\Delta t \dot{\boldsymbol{\gamma}}_0 [{}^{(4)}\mathbf{C}_G : \mathbf{H}_1({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}, {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{x})] \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}) &= \\ \left[\sum_{a=1}^n \mathbf{P}^{(a)*} \operatorname{sgn}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\tau}^{(a)} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{x}^{(a)}) \cdot \right. \\ &\left. \left(\frac{|\mathbf{P}^{(a)*} : {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{x}^{(a)}|}{{}^{t+\Delta t}g^{(a)}} \right)^k \right] \end{aligned} \quad (24)$$

式(20)~式(23)中含 $t+\Delta t$ 时刻的未知量 ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma}$, $\mathbf{P}^{(a)*}$, ${}^{t+\Delta t}g^{(a)}$ 和 ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{x}^{(a)}$, 对其求解可采用 Newton-Raphson 迭代结合校正的方法来进行求解。

关于晶格取向的计算, 可以用晶轴坐标系与整体固定坐标系标架的关系来描述. 假定在初始时刻 $t=0$ 晶格坐标系基向量与固定坐标系基向量相差一个角度, 即

$$\mathbf{e}_i = {}^0T_{ik} {}^0\mathbf{e}_k^{\text{crys}} \quad (25)$$

则一个时间增量后, 由于晶轴坐标系相对整体坐标系有一个增量旋转, 使得

$$\mathbf{e}_i = {}^{\Delta t}T_{ik} {}^{\Delta t}\mathbf{e}_k^{\text{crys}} \quad (26)$$

式中

$${}^{\Delta t}\mathbf{e}_k^{\text{crys}} = {}^{\Delta t}\Delta R_{kl} {}^0\mathbf{e}_l^{\text{crys}}$$

于是式(26)可写成

$$\mathbf{e}_i = {}^{\Delta t}T_{ik} {}^{\Delta t}\Delta R_{kl} {}^0\mathbf{e}_l^{\text{crys}}$$

因此可知

$${}^{\Delta t}T_{ij} = {}^0T_{ik} {}^{\Delta t}\Delta R_{jk}^*$$

并推得

$${}^{t+\Delta t}T_{ij} = {}^tT_{ik} {}^{t+\Delta t}\Delta R_{jk}^*$$

即

$$\begin{aligned} {}^{\Delta t}\mathbf{T} &= {}^0\mathbf{T} \cdot {}^{\Delta t}\Delta \mathbf{R}^{*\text{T}} \\ {}^{t+\Delta t}\mathbf{T} &= {}^t\mathbf{T} \cdot {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{R}^{*\text{T}} \end{aligned} \quad (27)$$

式中的 ${}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{R}^*$ 按下式计算

$$\begin{cases} {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{R}^* = \\ \left(\mathbf{I} - \frac{1}{2} {}^{t+\Delta t}\Delta \boldsymbol{\omega}^* \right)^{-1} \cdot \left(\mathbf{I} + \frac{1}{2} {}^{t+\Delta t}\Delta \boldsymbol{\omega}^* \right) \\ {}^{t+\Delta t}\Delta \boldsymbol{\omega}^* = \\ \frac{1}{2} ({}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{F}^* \cdot {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}^{*-1} - {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}^{*\text{T}} \cdot {}^{t+\Delta t}\Delta \mathbf{F}^{*\text{T}}) \end{cases} \quad (28)$$

式中的 $\Delta \mathbf{F}^*$ 按下列公式(采用了预报校正方法)计算

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{L} &= \Delta \mathbf{F} \cdot \left[\frac{1}{2} ({}^t\mathbf{F} + {}^{t+\Delta t}\mathbf{F}) \right]^{-1} \\ \Delta \mathbf{F}^{*\prime} &= \\ \left[\Delta \mathbf{L} - {}^t\mathbf{F}^* \cdot \left(\sum_{a=1}^n (m^{(a)} n^{(a)}) \Delta \boldsymbol{\gamma}^{(a)} \right) \cdot {}^t\mathbf{F}^{*-1} \right] \cdot {}^t\mathbf{F}^* \\ \Delta \mathbf{F}^* &= \{ \Delta \mathbf{L} - ({}^t\mathbf{F}^* + \Delta \mathbf{F}^{*\prime}) \cdot \\ &\left[\sum_{a=1}^n (m^{(a)} n^{(a)}) \Delta \boldsymbol{\gamma}^{(a)} \right] \cdot \\ &({}^t\mathbf{F}^* + \Delta \mathbf{F}^{*\prime})^{-1} \} \cdot ({}^t\mathbf{F}^* + \Delta \mathbf{F}^{*\prime}) \end{aligned} \quad (29)$$

由于增量计算过程中 Schmid 张量 $\mathbf{P}^{(a)*}$ 和 $g^{(a)}$ 的相对变化较小, 采用隐式与显式结合的算法可以大大节省时间并改善 Newton-Raphson 迭代的稳定性。

2 典型循环载荷下力学行为的计算

为了验证建立起的基于晶体塑性的本构理论和算法, 本文针对涡轮盘用 ZSGH4169 多晶镍基合金, 计算分析了试验条件下材料的循环应力应变行为, 包括 Bauschinger 效应、应变硬化和棘轮效应等, 以验证模型对这些力学行为的模拟能力。

2.1 计算方法

通过对某涡轮盘的宏观应力分析, 得到局部进入屈服区域的应力状态, 采用前面建立的晶体塑性本构理论来计算 ZSGH4169 多晶镍基合金在循环加载进入塑性后, 晶粒尺度的塑性变形的积累和不均匀应力, 具体分析步骤为:

1) 将有限元方法计算得到的涡轮盘应力分布作为分析基础, 利用涡轮盘应力分布计算结果确定涡轮盘危险区域(即高应力区)。

2) 采用 Voronoi 多晶集合体作为材料的代

表性体积单元(不考虑晶粒的尺寸效应,多晶集合体的尺寸由晶粒数确定),该多晶集合体中的晶粒形状和取向(晶粒的力学性质是各向异性的)均采用随机计算方法加以确定.该多晶集合体的几何构成和单元划分,如图 1 所示,含有 50 个单晶晶粒,27 000 个 8 节点六面体单元和 29 791 个节点.多晶集合体中的晶粒形状和取向(晶粒的力学性质是各向异性的)均用随机计算方法加以确定.

3) 利用前述的晶体塑性理论方法,将涡轮盘关键区域应力状态作为加载条件对上述多晶几何体代表性体积单元进行循环加载计算,从而得到该区域材料非弹性变形(塑性变形)的演化过程、应力分布不均匀性的发展过程.

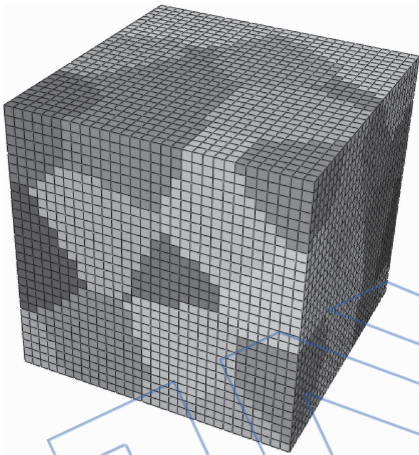


图 1 Voronoi 多晶集合体代表性体积单元
Fig.1 RVE of a voronoi polycrystalline aggregate

2.2 载荷条件

对涡轮盘在实际循环载荷条件下的应力应变历程可通过代表性体积单元在承受循环载荷下力学行为模拟来进行估计,模拟分析可根据实际过程按应变控制或应力控制进行.

2.3 材料参数

ZSGH4169 多晶镍基合金的循环应力应变曲线可从《航空发动机设计用材料数据性能手册》^[18]得到,曲线可以用下列 Ramberg-Osgood 公式来描述:

$$\frac{1}{2}\Delta\epsilon_i = \frac{\Delta\sigma}{2E} + \left(\frac{\Delta\sigma}{2K'}\right)^{1/n'} \tag{30}$$

式中 $\Delta\epsilon_i$ 为循环应变幅值, $\Delta\sigma$ 为循环应力幅值; E 为材料的弹性模量(近似), K' 为循环应力应变曲线的硬化系数, n' 为相应的硬化指数.对于不同的温度环境,上式中的参数取值不同,在 400, 500, 650℃ 下的参数取值列在表 1 中.

ZSGH4169 多晶镍基合金具有较复杂的微观材料结构,在其基体 γ 相中通过析出 γ' 相(面心立方)和 γ'' 相(体心立方)来增强材料,而晶界上又含有针状 δ 相(斜方晶体结构),因此材料在外载作用下有多系滑移的倾向.

表 1 不同温度下,ZSGH4169 多晶镍基合金循环应力应变曲线的参数^[18]

Table 1 Parameters of cyclic stress and strain curve for ZSGH4169 nickel based polycrystalline superalloy at different temperatures

温度/℃	E/MPa	K'/MPa	n'
400	177 000	1 682	0.091
500	167 500	1 749	0.103
650	150 500	1 412	0.096

金属材料的塑性变形量一般来说主要取决于两个方面:一方面是滑移系的数目,滑移系越多意味着材料越易于塑性变形;另一方面是滑移系的硬化率,硬化率越小塑性变形越容易持续.对于多晶材料,晶粒的滑移会受到相邻晶粒的约束,因此能够启动的滑移系实际远低于晶粒的滑移系数目.考虑到这一点,在计算时按八面体滑移模式(滑移系数目 $n=12$)来计算.由于 ZSGH4169 多晶镍基合金属面心立方晶系,由本构张量改写的材料弹性矩阵 C 如下:

$$C = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ C_{2211} & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ C_{3311} & C_{3322} & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{1212} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{2323} \end{bmatrix} \tag{31}$$

其中

$$\begin{aligned} C_{1111} &= C_{2222} = C_{3333} = C_{11} \\ C_{1122} &= C_{2211} = C_{1133} = C_{3311} = \\ &C_{2233} = C_{3322} = C_{12} \\ C_{1212} &= C_{1313} = C_{2323} = G_{12} = \\ &G_{13} = G_{23} = G = C_{44} \end{aligned}$$

为晶轴坐标系下的材料弹性矩阵系数.晶轴坐标系下又有

$$\begin{aligned} \nu_{12} &= \nu_{21} = \nu_{13} = \nu_{31} = \nu_{23} = \nu_{32} = \nu \\ C_{11} &= E_{[001]}(1 - \nu^2)/(1 - 3\nu^2 - 2\nu^3) \end{aligned}$$

和

$$C_{12} = E_{[001]}(\nu + \nu^2)/(1 - 3\nu^2 - 2\nu^3)$$

于是参考试验结果并由数值模拟可以拟合得到 ZSGH4169 多晶镍基合金单晶晶粒的材料参数(650℃),见表 2. 表 2 中 h_0 是初始硬化率, τ_0 是均匀变形条件下的单晶初始临界分解切应力, τ_s 是临界分解切应力的饱和值, θ 是材料常数,一般取 $1 \leq \theta \leq 1.4$.

表 2 650℃ 温度下, ZSGH4169 多晶镍基合金单晶晶粒的材料性质参数

Table 2 Material parameters of single crystal for ZSGH4169 nickel based polycrystalline superalloy at 650℃

C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	τ_0/MPa	τ_s/MPa	h_0/MPa
206.7	138.0	73.6	290	320	80
$\dot{\gamma}_0/\text{s}^{-1}$	θ	k	a/MPa	c	q/s^{-1}
0.001	1	150	3000	800	0.0005

表 2 中的参数可以用于单晶、定向结晶和多晶材料的弹黏塑性(包括蠕变和松弛)单调和循环加载变形的分析.

采用多晶集合体代表性体积单元来模拟材料微元的变形过程时,需要假定代表性体积单元满足宏观均匀变形条件 and 对称周期条件. 利用 ABAQUS 软件提供的控制位移约束的功能,对图 1 所示的多晶集合体施加指定表面拉伸外载,加载过程中由位移约束使得代表性体积单元各外表面变形过程中保持平移,从而满足宏观均匀变形条件 and 对称周期条件.

2.4 ZSGH4169 多晶镍基合金的循环载荷力学行为计算

在材料疲劳性能表征时,一般会开展应变控制 $R=-1$ 循环疲劳试验. 而采用多晶集合体代表性体积单元对其进行数值模拟,可以对材料在此循环过程中的材料微结构的演化、非弹性变形的不均匀积累、损伤萌生和演化的局部环境等开展分析.

2.4.1 应变控制对称单轴拉压循环下的变形响应

在对称循环特性的分析中,采用正弦波形的位移控制,分别对应变范围为 $\pm 0.005, \pm 0.007, \pm 0.009, \pm 0.011$ 和 ± 0.013 的对称循环进行数值模拟,如图 2 所示,通过数值模拟再现金属材料在循环试验中常见的应变硬化现象和 Bauschinger 效应.

2.4.2 非对称单轴循环加载下的变形响应

构件或零件实际的循环加载往往是非对称的,在非对称循环情形下构件或零件局部高应力区域材料循环塑性变形的累积经常呈现出与对称循环应力应变响应不同的过程. 图 3 是材料代表性体积单元在单轴拉压不对称应力循环下塑性变形不断累加的一个算例. 在此算例中加载应力由不对称三角波控制,计算发现背应力的演化对滑移切应变率有很大的影响,滑移切应变率的数值很大程度取决于背应力演化主导的非线性硬化过程.

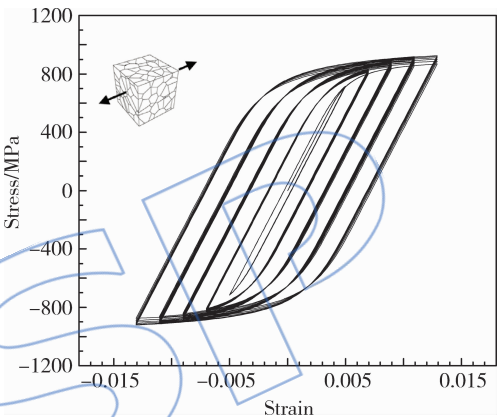


图 2 应变拉压对称循环下代表性体积单元的应力应变响应

Fig. 2 Stress/strain response of RVE under symmetrical tension and compression cyclic loadings

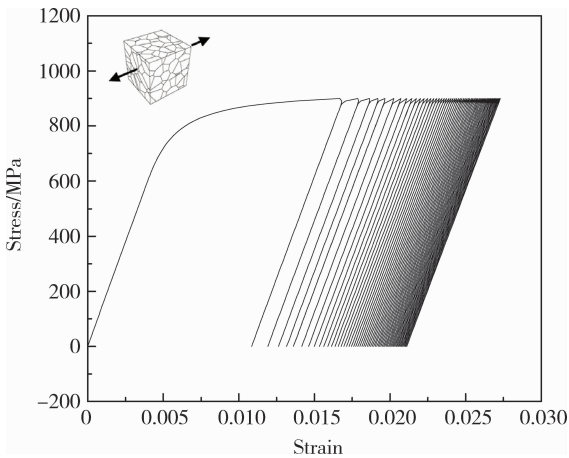


图 3 应力拉压不对称循环下代表性体积单元的应力应变响应(棘轮效应)

Fig. 3 Stress/strain response of RVE under asymmetric tension and compression loadings (ratchet effect)

图 3 表明在所给材料模型参数的条件下,不对称应力循环加载可以导致材料的表观塑性变形

不断累积. 由于多晶材料的非均质性, 这种累积在材料内部局部区域比表面更为严重. 塑性变形的不断累积意味着材料内部微结构不断的演化, 这种演化会导致材料局部形成损伤或会促使材料损伤愈加严重.

3 结 论

基于晶体塑性本构理论, 发展了适用于多晶镍基合金材料的细观分析方法, 并给出了 Voronoi 多晶集合体在指定载荷下的循环应力应变计算结果. 计算结果表明: 该模型可以合理描述多晶材料在对称循环下的应变硬化现象和 Bauschinger 效应. 通过非对称循环数值模拟, 证实了该模型具有对棘轮效应的描述能力, 且计算发现背应力的演化对滑移切应变率有很大的影响, 滑移切应变率的数值很大程度取决于背应力演化主导的非线性硬化过程.

需要指出, 多晶镍基合金材料虽然晶粒内的晶格形式具有 FCC(face-centred cubic) 结构, 但由于晶内同时存在两种相, 其变形方式很复杂. 对此问题进一步的认识需要考虑更小尺度的分析, 本文暂不予以讨论.

参考文献:

[1] Taylor G I, Elam C F. The plastic extension of fracture of aluminum crystal[J]. Proceedings of the Royal Society A, 1925, 108(745): 28-51.

[2] Taylor G I, Elam C F. The distortion of an aluminum crystal during a tensile test[J]. Proceedings of the Royal Society; Series A, 1923, 102(719): 643-667.

[3] Taylor G I. The mechanism of plastic deformation of crystal: Part 1 theoretical[J]. Proceedings of the Royal Society; Series A, 1934, 145(855): 362-387.

[4] Hill R, Rice J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1972, 20(6): 401-413.

[5] Asaro R J. Crystal plasticity[J]. Journal of Applied Mechanics, 1983, 50(4b): 921-934.

[6] Rice J R. Inelastic constitutive relations for solids: an internal variable theory and its application to metal plasticity

[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1971, 19(6): 433-455.

[7] Peirce D, Asaro R J, Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids[J]. Acta Metallurgica, 1983, 31(12): 1951-1976.

[8] Hill R, Havner K S. Perspectives in the mechanics of elastoplastic crystal[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1982, 30(1): 5-22.

[9] Havner K S. Finite plastic deformation of crystalline solids [M]. Cambrige, UK: Cambridge University Press, 1992.

[10] Nasser S N. Rate dependent finite elastic plastic deformation of polycrystals[J]. Proceedings of the Royal Society: Series A, 1986, 407(1833): 343-375.

[11] Rashid M M, Nasser S N. A constitutive algorithm for rate dependent crystal plasticity[J]. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, 1992, 94(2): 201-228.

[12] Cuitino A M, Ortiz M. Computational modelling of single crystals[J]. Modeling and Simulation in Material Sciences and Engineering, 1999, 1(3): 225-263.

[13] Roters F, Eisenlohr P, Hantcherli L, et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multi-scale methods in crystal plasticity finite-element modeling: theory, experiments, applications [J]. Acta Materialia, 2010, 58(4): 1152-1211.

[14] 张克实, 石艳柯, 许凌波, 等. 对称拉压循环下金属屈服硬化的各向异性与细观变形转动的不均匀性[J]. 金属学报, 2011, 47(10): 1292-1300.

ZHANG Keshi, SHI Yanke, XU Lingbo, et al. Anisotropy of yielding/hardening and microinhomogeneity of deforming/rotating for a polycrystalline metal under cyclic tension-compression[J]. Acta Metallurgica Sinica, 2011, 47(10): 1292-1300. (in Chinese)

[15] 尹泽勇, 岳珠峰, 杨治国, 等. 各向异性单晶合金结构强度与寿命[M]. 北京: 国防工业出版社, 2003.

[16] Hutchinson J W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials[J]. Proceedings of the Royal Society; Series A, 1976, 348(1652): 101-127.

[17] Chaboche J L. A review of some plasticity and viscoplasticity constitutive theories[J]. International Journal of Plasticity, 2008, 24(10): 1642-1693.

[18] 《航空发动机设计用材料数据手册》编委会. 航空发动机设计用材料数据手册: 第 4 册[M]. 北京: 航空工业出版社, 2010.