

晶体塑性本构模型材料参数识别方法研究^{*}

隋天校¹, 石多奇¹, 杨秦政¹, 付强², 巩萃颖², 董成利³, 杨晓光¹

- (1. 北京航空航天大学 能源与动力工程学院, 北京 100191;
2. 中国航空发动机集团有限公司 中国航空发动机研究院, 北京 101300;
3. 中国航发北京航空材料研究院, 北京 100095)

摘要: 为建立简单高效的晶体塑性本构模型材料参数识别方法, 将传统Voronoi多晶/柱晶微结构模型进行了简化, 探索了简化微结构模型的建模策略, 验证了利用简化微结构模型进行材料参数识别的合理性, 分别形成了针对多晶、柱晶与单晶合金的材料参数识别策略, 获得了ZSGH4169, DZ125与DD6合金共15组材料参数。结果显示: 简化模型的网格数量远远低于传统Voronoi微结构模型, 极大地降低了计算代价; 为保证简化模型的结果合理且计算代价适中, 简化多晶模型需大致含有125个晶粒; 相同材料参数条件下, 简化模型与传统Voronoi模型的计算结果基本一致; 3类合金仿真/实验结果间的最大误差均不超过5%。文中所开发材料参数识别方法计算成本小、操作难度低、运行效率高。

关键词: 晶体塑性; 材料参数识别; Voronoi模型; 晶粒; 微结构建模

中图分类号: V231.91 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-4055 (2023) 03-210593-10

DOI: 10.13675/j.cnki. tjjs. 210593

Material Parameter Identification Method of Crystal Plastic Constitutive Models

SUI Tian-xiao¹, SHI Duo-qi¹, YANG Qin-zheng¹, FU Qiang², GONG Cui-ying², DONG Cheng-li³, YANG Xiao-guang¹

- (1. School of Power and Energy, Beihang University, Beijing 100191, China;
2. Aero Engine Academy of China, Aero Engine Corporation of China, Beijing 101300, China;
3. AECC Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, China)

Abstract: This investigation aims to develop a simple and efficient material parameter identification method of crystal plastic constitutive models. The traditional Voronoi polycrystal and columnar crystal microstructure model was simplified. And the modeling strategy of the simplified model was explored. It was verified that using the simplified model to identify the material parameter is reasonable. The material parameter identification methods for polycrystal, columnar crystal and single crystal superalloys were proposed respectively. Fifteen sets of material parameters of ZSGH4169, DZ125, and DD6 superalloys were obtained. Results show that the element quantity of the simplified model was much lower than that in the traditional Voronoi model, which could significantly reduce the computational cost. In order to ensure that the results of the simplified model are reasonable and the computational cost is acceptable, the simplified polycrystal model should contain approximately 125 grains. The calculation results of the simplified model were consistent with the conventional Voronoi model using the

^{*} 收稿日期: 2021-08-29; 修订日期: 2022-03-23。

作者简介: 隋天校, 博士生, 研究领域为高温结构强度与疲劳断裂。

通讯作者: 石多奇, 博士, 教授, 研究领域为发动机结构强度和寿命可靠性、高温合金与复合材料力学行为与本构理论等研究。E-mail: shdq@buaa.edu.cn

引用格式: 隋天校, 石多奇, 杨秦政, 等. 晶体塑性本构模型材料参数识别方法研究[J]. 推进技术, 2023, 44(3):210593.
(SUI Tian-xiao, SHI Duo-qi, YANG Qin-zheng, et al. Material Parameter Identification Method of Crystal Plastic Constitutive Models[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2023, 44(3):210593.)

same material parameters. The maximum relative error between the simulation results and the experiment results for three alloys did not exceed 5%. The proposed material parameter identification method has the advantages of low calculation cost, low implement difficulty, and high operation efficiency.

Key words: Crystal plasticity; Material parameter identification; Voronoi model; Grain; Microstructure modeling

1 引 言

随着燃气涡轮发动机涡轮前温度的不断提高,先进高温合金材料被广泛用于制作热端零部件,热端部件的结构形式与服役环境愈发复杂,涡轮叶/盘的结构强度问题更加突出^[1-3]。良好的可靠性与耐久性设计有助于提高推进系统的战备完好性与任务成功率、减少维修人力和后勤保障费用^[4],准确的局部应力/应变场模拟是可靠性与耐久性设计的前提。晶体塑性模型充分考虑了高温合金的变形机制,可精确地模拟复杂载荷下结构材料的局部变形,在航空航天舰船推进系统与核电领域的结构强度设计中得到了广泛的应用^[5-6]。

晶体塑性模型中含有大量待定的参数,可大致分为两类。第一类参数反映了材料的固有物理特性,可称之为物理参数,例如:Burgers矢量幅值、反相畴界能等,主要通过第一性原理计算或实验直接测试获得;第二类为材料参数,主要反映材料的宏观力学性能,需通过反复调整参数并拟合实验数据确定^[7],通常使用“Voronoi晶粒模型”或“简化晶粒模型”开展计算,然而“Voronoi晶粒模型”的计算成本高,迭代调整材料参数的过程费时费力,“简化晶粒模型”缺乏足够的建模规范与依据。

根据晶粒微结构的不同,可将高温合金材料分为单晶、定向凝固柱晶与多晶3类,3类高温合金的材料参数识别方法有所不同。

单晶高温合金力学性质表现出各向异性,可认为其不包含晶界,材料参数识别过程中无需对微结构进行建模。西北工业大学岳珠峰团队^[8-10]与华中科技大学黄敏生团队^[11]分别根据实验曲线标定了DD3、DD6与CMSX-4合金的材料参数;北京航空航天大学石多奇团队^[12]与王荣桥团队^[13]将数学优化算法用于识别材料参数,提高了优化效率;英国布里斯托大学Li等^[14]对晶体学模型进行了简化表达,利用简化模型得到了SRR99合金的材料参数,极大地减小了计算代价;英国剑桥大学MacLachlan等^[15]与美国普惠公司Staroselsky等^[16]反复调整参数,直至仿真/试验结果吻合良好,得到CMSX-4与PWA1484的

材料参数。美国佐治亚理工大学Neu团队^[17]将晶体塑性模型进行降维表达,利用一维模型确定CMSX-8的材料参数,提高了计算效率。

定向凝固柱晶高温合金宏观上表现出横向各向同性,不包含横向晶界,需考虑柱状晶微结构的影响。南航温卫东团队^[18-19]认为“定向凝固合金纵向受载”与“单晶合金<001>受载”等效,得到了IC10的材料参数,纵向实验数据拟合结果良好;美国佐治亚理工大学Neu团队^[20]与法国巴黎高等矿业学院Caille-
taud团队^[21-23]分别建立柱状晶微结构模型,迭代调整材料参数,直至仿真结果满足要求。

多晶高温合金宏观上表现出各向同性,通常建立Voronoi模型考虑晶粒微结构的影响。广西大学张克实团队^[24-25]与北京航空航天大学杨晓光团队^[26-28]分别建立了多晶合金Voronoi晶粒模型,利用“试错法”得到了相应材料参数,仿真结果精度良好;英国帝国理工学院Dunne团队^[29]建立了Voronoi模型研究晶粒微结构影响,通过拟合数据得到了材料参数;美国俄亥俄州立大学Park等^[30]利用“简化晶粒模型”校正了晶体塑性模型的材料参数,用于预测“Voronoi模型”的力学响应。

单晶合金的材料参数识别方法相对成熟,借助简化模型及优化算法可完成材料参数识别。定向凝固柱晶与多晶合金的宏观力学性能是众多晶粒力学行为的统计平均结果,故不可忽略晶粒微结构的影响,目前的参数识别方法大多需要建立微结构模型,反复计算微结构模型的力学响应。然而,传统Voronoi晶粒建模过程繁琐,操作复杂度高,且模型越接近真实微结构,其网格数量多,反复迭代计算并调整材料参数需耗费大量时间精力。简化晶粒模型建模相对简单,计算代价小,然而“网格收敛性测试”以及“模型的必要尺寸”等问题经常被忽略,简化晶粒模型缺乏足够的建模策略。截至目前,晶体塑性模型材料参数的识别方法仍不够简单有效,这制约着晶体塑性模型在燃气涡轮发动机热端部件结构强度设计中的进一步应用。因此,开发简单有效的材料参数识别方法具有一定的工程与学术价值,相关研究亟待开展。

针对晶体塑性本构模型的材料参数识别问题,将传统的 Voronoi 晶粒有限元模型进行了简化,减小了网格数量,通过计算确定了多晶、柱晶与单晶合金“简化晶粒模型”的合理建模策略,验证了简化模型与传统模型计算结果的一致性,利用简化模型得到了 ZSGH4169, DZ125 与 DD6 合金不同温度下的材料参数,成功模拟了多种材料的拉伸力学特性,建立了一套简单有效的材料参数识别策略。

2 简化模型建模与参数识别方法

2.1 本构模型理论框架

用于拟合材料参数的试验数据应变范围较小,宏观上近似满足小变形假设,同时推进系统热端部件也不允许发生较大的宏观变形,为节约计算成本,利用文献[14]的相关理论方法,建立了小变形框架下的晶体塑性本构模型,并将其用于材料参数识别。

虽然高温合金材料局部的微观变形可能较大,但其宏观表现的变形较小,因此利用小变形框架下的晶体塑性模型计算 Voronoi 晶粒模型的宏观力学响应具有一定的合理性。小变形框架下,参考构型与即时构型重合,无需通过变形梯度张量进行转换^[31-32],极大地减小计算代价,提高了效率。

有限变形框架下,Green 应变率与变形率张量之间的关系^[32]如式(1)所示

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \mathbf{F} \quad (1)$$

式中 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ 表示 Green 应变率张量, $\mathbf{D}$ 表示变形率张量,其为速度梯度张量 $\mathbf{L}$ 的对称部分, $\mathbf{F}$ 表示变形梯度张量。

小变形框架下,即时构型与参考构型重合,变形梯度 $\mathbf{F}$ 可近似为单位矩阵 $\mathbf{I}$,此时变形率张量与应变率张量相等。根据晶体塑性理论的运动学分析,可得到小变形框架下全局坐标系下的塑性应变率与滑移系上的塑性应变率之间的关系

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p = \mathbf{D}_p = \sum_{\alpha=1}^{18} \dot{\gamma}_{(\alpha)} \text{sym}(\mathbf{m}_{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\alpha}) \quad (2)$$

式中 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_p$ 表示全局坐标系下的塑性应变率张量, $\mathbf{D}_p$ 表示变形率张量的塑性部分, $\mathbf{m}_{\alpha}$ 表示滑移方向单位矢量, $\mathbf{n}_{\alpha}$ 表示滑移面法向单位矢量, $\dot{\gamma}_{\alpha}$ 表示滑移系上的塑性应变,运算符 $\otimes$ 表示张量积运算, $\text{sym}()$ 表示取矩阵对称部分。晶体塑性理论运动学框架的详细描述可参见文献[31-33]。

对于镍基高温合金,其晶体学模型通常考虑 2 类 18 个滑移系,包括 12 个八面体滑移系与 6 个立方滑移系,如图 1 所示,其中图 1(a)表示八面体滑移系,记

为 $\{111\}\langle 110 \rangle$,图 1(b)表示立方滑移系,记为 $\{100\}\langle 110 \rangle$ 。

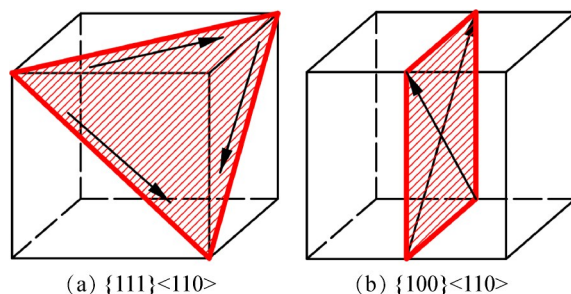


Fig. 1 Schematic illustration of slip systems

八面体滑移系上的塑性应变变化为^[14]

$$\dot{\gamma}_{\alpha}^{\alpha} = \left\langle \frac{|\tau_{\alpha}^{\alpha} - x_{\alpha}^{\alpha}| - k_{\alpha} - r_{\alpha}^{\alpha}}{K_{\alpha}} \right\rangle^{n_{\alpha}} \text{sign}(\tau_{\alpha}^{\alpha} - x_{\alpha}^{\alpha}) \quad (3)$$

式中 τ_{α} 为八面体滑移系的分解剪切应力, x_{α} 为八面体滑移系的运动硬化变量, r_{α} 为八面体滑移系的各向同性硬化变量, k_{α} 为八面体滑移系的临界分解剪切应力,若 $\langle x \rangle$ 内的变量 $x > 0$,则 $\langle x \rangle = x$,否则 $\langle x \rangle = 0$, $\text{sign}()$ 为符号函数, α 在 1~12 之间取值,表示不同滑移系, K_{α} 与 n_{α} 为温度相关的材料参数。

八面体滑移系分解剪切应力可写为^[33]

$$\tau^{\alpha} = \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{m}_{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{\alpha}) \quad (4)$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}$ 为全局坐标系下的应力张量,运算符 $:$ 表示双点积运算,其运动硬化变量与各向同性硬化变量的演化方程为^[14]

$$\dot{x}_{\alpha}^{\alpha} = c_{\alpha} \dot{\gamma}_{\alpha}^{\alpha} - a_{\alpha} x_{\alpha}^{\alpha} |\dot{\gamma}_{\alpha}^{\alpha}| \quad (5)$$

$$\dot{r}_{\alpha}^{\alpha} = (q_{\alpha} - b_{\alpha} r_{\alpha}^{\alpha}) |\dot{\gamma}_{\alpha}^{\alpha}| \quad (6)$$

式中 c_{α} , a_{α} , q_{α} , b_{α} 为材料参数。立方滑移系上的塑性应变、运动硬化变量与各向同性硬化变量演化方程与式(3)~(6)类似,本构模型的详细说明可参考文献[14]。

2.2 镍基高温合金晶粒建模及其简化方法

按照晶粒微结构的不同,镍基高温合金通常可分为 3 类:多晶、柱晶与单晶,3 类高温合金的微结构建模方法有所不同。

英国莱斯特大学 Dai 等^[34]给出了 3 类高温合金的典型微观组织图谱,如图 2 所示。其中,图 2(a)表示多晶合金,多晶合金通常包含大量晶粒,各晶粒的晶体取向并不相同,宏观上多晶合金表现出各向同性,其宏观力学性能是众多各向异性晶粒的统计平均结果。

图 2(b)表示柱晶合金,柱晶合金不包含横向晶界,宏观上表现横向各向同性,各晶粒纵向(L)取向

大致为<001>取向,其横向(T)取向通常按随机分布处理。

图 2(c)表示单晶合金,其宏观上表现出立方对称性,单晶合金不含有晶界,可将其作为一个晶粒处理。为减小计算代价,可用一个单元模拟标准试样的标距段,建立有限元模型计算单晶合金的力学响应,如图 3(a)所示。边界条件设置为:约束 XOY 平面 Z 轴方向的位移,约束 XO 线段 Y 轴方向的位移,约束 O 点 X 轴方向的位移,对 AZB 平面施加一定的位移,单元类型选择为 C3D8R-Enhanced。

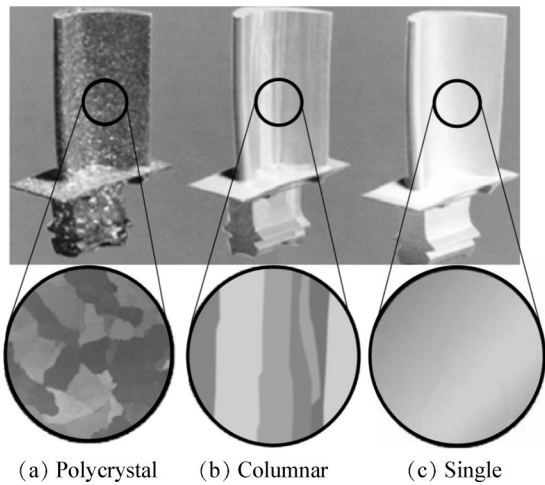


Fig. 2 Schematic illustration of microstructure of the turbine blades^[34]

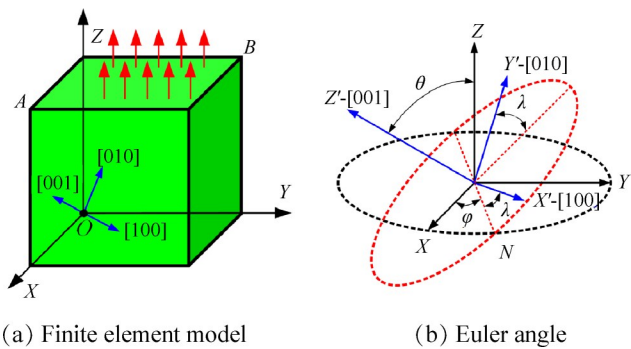


Fig. 3 Modeling of single crystal superalloys

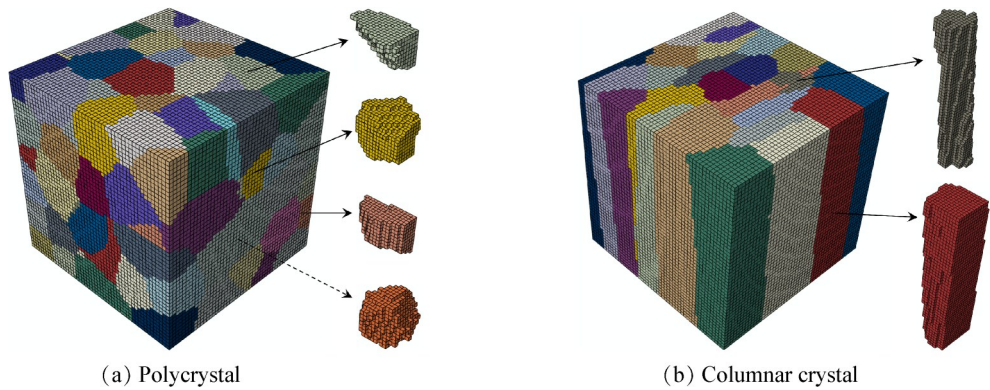


Fig. 4 Traditional Voronoi grain model of the nickel-based superalloys

晶体坐标系与全局坐标系往往不重合,需要通过 3 个欧拉角(进动角 φ ,章动角 λ 与自转角 θ)标定晶粒的晶体取向,如图 3(b)所示。

多晶合金与柱晶合金均包含一定数量的晶粒,晶粒之间的取向并不相同,其宏观力学性能为众多晶粒力学行为的统计平均结果,因此在材料参数识别过程中需要建立“晶粒集合”模型。美国空军研究试验室为研究微结构对材料力学性能的影响,开发了开源软件 DREAM.3D。利用该软件可进行多晶合金与柱晶合金的传统 Voronoi 晶粒建模,如图 4 所示。

图 4(a)中共包含 126 个晶粒,每个晶粒随机设置一组欧拉角,当晶粒数量足够多时,多晶“晶粒集合”的宏观力学性能表现为各向同性;图 4(b)中包含 24 个柱状晶晶粒,每个晶粒设置一组欧拉角,进动角 φ 随机设定,章动角 λ 与自转角 θ 置为零,保证了柱晶“晶粒集合”表现横向各向同性的力学性能。

图 4 中传统 Voronoi“晶粒集合”模型接近真实微结构,可研究微结构对力学性能的影响。然而模型越接近真实微结构,其网格数量越多,图 4 中网格数量达到 12.5 万,若将其用于识别材料参数,需反复迭代求解,导致计算成本过高,因此有必要对其进行简化,如图 5。

图 5(a)表示简化多晶“晶粒集合”模型,每个单元表示 1 个晶粒,模型共包含 125 个单元。图 5(b)表示简化柱晶“晶粒集合”模型,每 40 个单元表示 1 个柱晶晶粒,模型共包含 25 个晶粒/1000 个单元。

以上分析表明:相比于传统 Voronoi“晶粒集合”模型,简化“晶粒集合”模型的计算代价低,利于反复迭代计算,适于参数识别,根据宏观性能数据可快速得到材料参数。进而可将所得参数带入传统 Voronoi“晶粒集合”模型,研究微结构对宏观力学性能的影响^[35]。

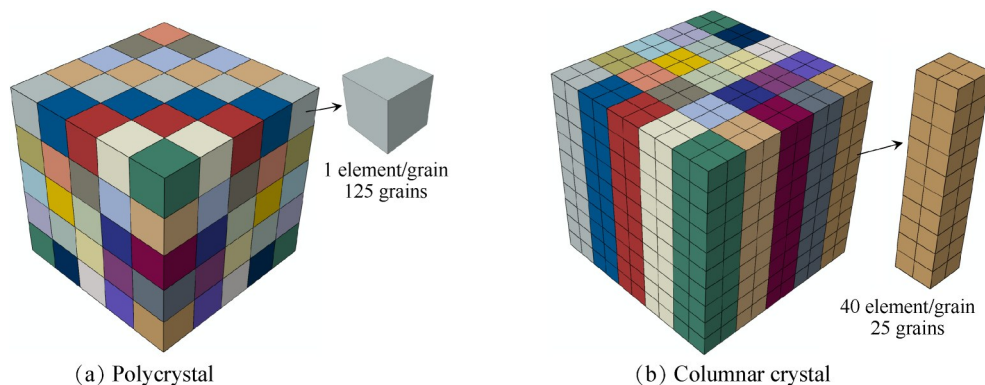


Fig. 5 Simplified grain model of nickel-based superalloys

2.3 简化模型建模及材料参数识别策略

将前述晶体塑性本构模型开发为通用有限元软件平台下的用户材料子程序(UMAT),用于计算文中3类模型的力学响应。

针对单晶高温合金材料参数识别问题,可参考文献[14]将晶体学模型进行重构简化,利用MATLAB数学软件将简化后的模型编写为计算程序,调用软件Lsqcurvefit优化工具箱,根据仿真/实验数据之间的误差反复迭代调整材料参数,直至误差满足要求或达到迭代停止条件。借助数学软件,可基本实现单晶合金材料参数识别过程的自动化、快速化与简单化。

利用上述方法,根据<001>与<111>取向的拉伸实验数据^[36],得到了DD6合金在20℃下的材料参数,值得注意的是:立方滑移系的材料参数仅影响<111>拉伸曲线,八面体滑移系的材料参数同时影响<001>与<111>拉伸曲线。

将所得材料参数带入图3(a)所示有限元模型,模拟了<001>,<111>,<011>与<112>取向的拉伸力学响应,计算结果如图6。不同晶体取向的拉伸力学性能差异较大,<001>与<111>仿真/实验结果^[36]间无可见差别,<011>拉伸性能的预测精度良好。说明针对

单晶合金的晶体塑性模型材料参数识别方法较为可靠。

针对多晶合金的材料参数识别问题,可利用简化“晶粒集合”模型迭代运算,调整材料参数。简化多晶“晶粒集合”的力学性能是所有晶粒力学行为的统计平均结果,因此“晶粒集合”模型需具备足够多的晶粒,否则无法获得统计学规律,难以保证其各向同性的力学性能,然而过多的晶粒数量造成计算成本上升。

为探索合适的晶粒数量,分别建立2×2×2,3×3×3,4×4×4,5×5×5共4个简化“晶粒集合”模型。2×2×2模型包含8个晶粒,随机设置其欧拉角,重复20次,建立20个有限元模型,赋予每个晶粒DD6合金20℃下的材料参数,载荷与边界条件参照图3(a)所示有限元模型,其20组应力应变曲线如图7(a)所示。

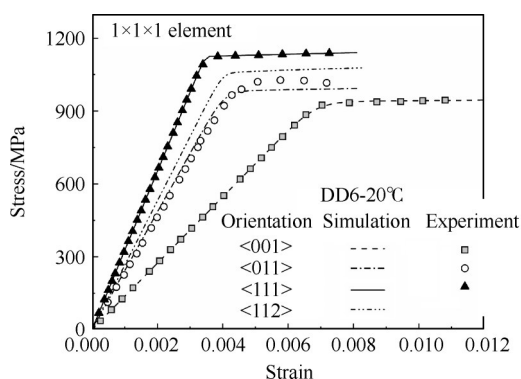
图7(a)所示模型中包含8个单元,将其中所有积分点的应力应变进行数值平均,将其作为“晶粒集合”的应力应变响应。结果显示:在20组不同欧拉角参数条件下,此模型的拉伸性能差异较大,2×2×2模型的拉伸特性具有较大的随机性,说明8个晶粒无法保证模型的宏观力学性能具有统计规律。

同理,计算了3×3×3,4×4×4,5×5×5模型在20组不同欧拉角参数条件下的应力应变响应,将20组曲线进行数值平均,得到其均值曲线,进而计算了每条应力应变曲线与其均值应力应变曲线之间的误差,误差定义为

$$error = \sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \frac{|\sigma_i - \sigma_i^{ave}|}{\sigma_i^{ave}} \quad (7)$$

式中 n 为曲线的数据点个数, σ_i 表示待求误差曲线的应力, σ_i^{ave} 表示相同应变处均值曲线的应力。

5×5×5模型的20组应力应变曲线如图7(b)所示,结果显示:不同欧拉角参数条件下,模型的拉伸特性几乎没有差别,相比于2×2×2模型,5×5×5模型

Fig. 6 Comparison between the simulation and the experiment results of DD6^[36] at 20℃

宏观上表现出各向同性的力学性能,此模型可用于材料参数识别。

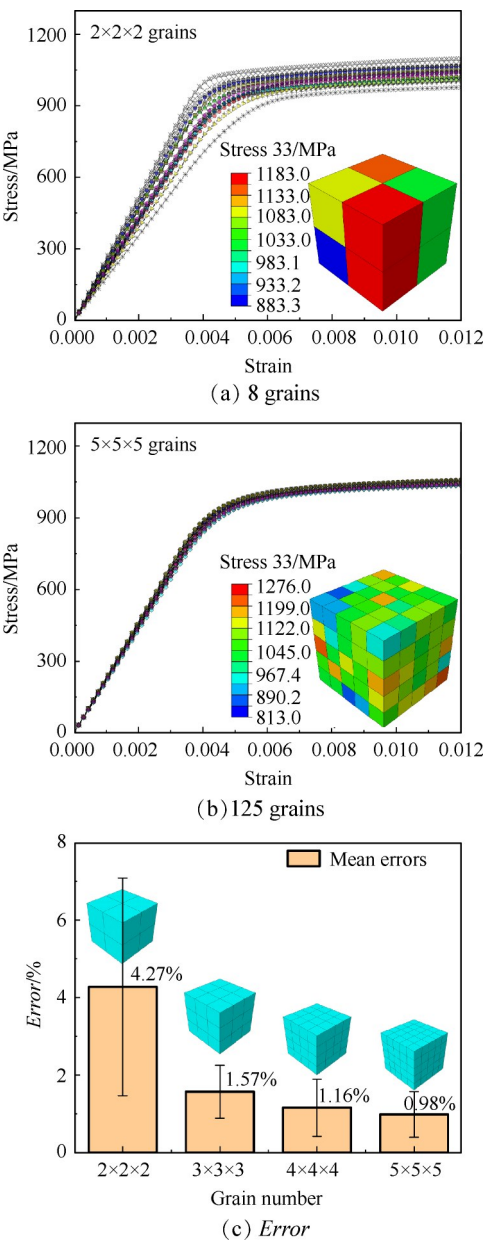


Fig. 7 Influence of the grain number on the tensile properties of the simplified model

4种模型各20条拉伸曲线与其均值曲线的误差平均值及标准差如图7(c)所示。随着晶粒数量增多,误差均值与标准差逐渐减小,当晶粒数量增加至125时,误差平均值基本稳定在1%左右。继续增加晶粒数量会增加计算成本,而对误差平均值的改善作用有限。因此5×5×5模型可保证宏观力学性能具有统计学规律,且模型计算代价适中,适于材料参数识别。

针对定向凝固柱晶高温合金,可利用简化柱晶

“晶粒集合”模型识别材料参数。根据图7(c)中结果,设置模型横向分布5×5晶粒,如图5(b)所示,进动角 φ 随机设定,章动角 λ 与自转角 θ 置为零,随机设定20组进动角 φ ,建立20个有限元模型,同样赋予每个晶粒DD6合金20℃下的材料参数,结果如图8。

当图5(b)中的简化柱晶“晶粒集合”模型纵向(L)受载时,在20组不同欧拉角参数条件下,模型的应力应变响应没有差异,并且与单晶合金<001>取向的拉伸特性完全相同,如图8。因此,若仅拟合定向凝固柱晶合金纵向力学性能曲线,可将“柱晶纵向受载”作为“单晶合金<001>受载”处理,无需建立“晶粒集合”模型,可进一步简化参数识别过程。

横向(T)受载时,应力应变均值曲线如图8,20组拉伸曲线与均值曲线间的误差均值为1.83%,“横向分布5×5晶粒”可保证模型宏观力学性能具有统计学规律,适于参数识别,Mises应力如图8右侧所示,纵向加载时应力分布均匀,横向加载时晶粒间应力差异大。

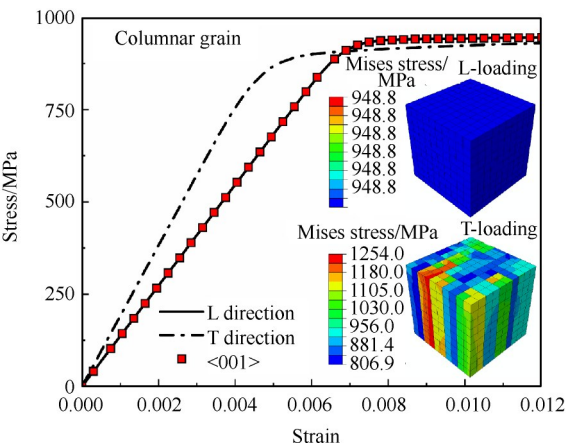


Fig. 8 Calculation results of the simplified columnar “grain set”

以上分析表明:图5所示的简化多晶“晶粒集合”与简化柱晶“晶粒集合”模型适用于识别材料参数,能够反映晶粒的统计学规律,并且计算代价较小。若仅拟合定向凝固柱晶合金纵向力学性能数据,则无需建立微结构模型,可按照“单晶合金<001>取向受载”处理。

3 结果与讨论

3.1 简化模型与传统模型计算结果对比

迭代计算“简化模型”进而识别材料参数需确保简化模型与传统Voronoi模型的计算结果基本一致。

为此利用 DREAM.3D 软件,建立图 4 所示的传统“晶粒集合”模型。

随机设置传统 Voronoi 多晶“晶粒集合”的欧拉角,重复 10 次,建立 10 个有限元模型,赋予每个晶粒 DD6 合金在 20℃ 下的材料参数,载荷与边界条件参照图 3(a) 中的模型设置,将所有积分点应力应变进行数值平均作为模型的宏观应力应变响应,结果如图 9(a) 所示。

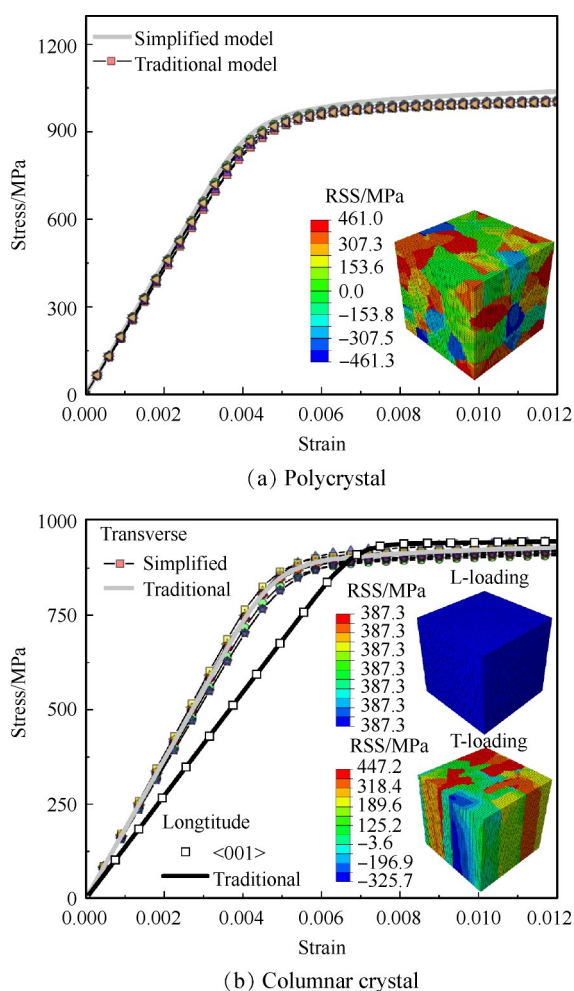


Fig. 9 Comparison between the calculation results of the traditional and simplified models

结果显示:10 组不同欧拉角参数的应力应变曲线几乎没有差别,且 10 组应力应变曲线与“简化模型”均值曲线间基本没有差异,说明传统模型能够反映多晶合金力学性能宏观各向同性的特点;简化模型均值曲线与传统 Voronoi 模型均值曲线之间的误差为 3%,多晶简化模型与传统 Voronoi 模型的计算结果基本一致。传统 Voronoi 模型(111)[0 $\bar{1}$ 1]滑移系的分解剪切应力(RSS)分布如图 9(a) 右侧所示,结合图 4(a) 可发现:由于晶体取向不同,不同晶粒之间分解剪

切应力差异较大。

同理,计算了 10 个传统 Voronoi 柱晶模型的应力应变响应,其结果如图 9(b) 所示。结果显示:当纵向加载时 10 组应力应变曲线完全相同,与单晶合金<001>拉伸曲线吻合,进一步验证“定向凝固柱晶合金纵向加载”与“单晶合金<001>取向加载”是等效的;横向加载时,简化模型与传统 Voronoi 模型均值应力应变曲线间的误差为 0.5%,两者计算结果基本一致。图 4(b) 所示模型(111)[0 $\bar{1}$ 1]滑移系的分解剪切应力(RSS)分布如图 9(b) 右侧所示,同样表明晶粒之间分解剪切应力相差较大。

图 4 所示的传统 Voronoi 多晶模型与 Voronoi 柱晶模型 Mises 等效应力分布如图 10 所示,应力水平较高的区域主要集中于晶界附近,由于晶粒之间晶体取向通常不相同,故晶界处变形不协调,导致该处应力较大。

以上结果表明:简化“晶粒集合”模型与传统 Voronoi “晶粒集合”模型的宏观力学性能计算结果基本是一致的;由于简化模型网格数量少,其计算代价低,故其更适用于材料参数识别;而传统 Voronoi 模型更接近高温合金的真实微结构,故其更适用于研究微结构对材料宏观力学性能的影响。

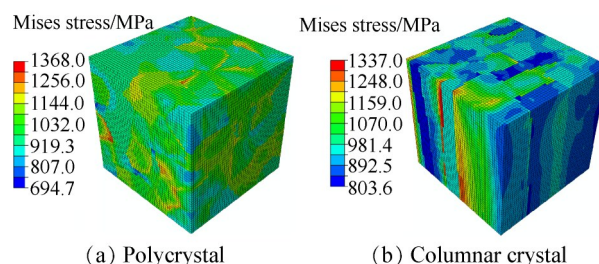


Fig. 10 Mises equivalent stress distribution of the microstructure model

3.2 材料参数识别结果

迭代计算调整材料参数过程中,可借助 Isight 等优化软件,实现多晶与柱晶合金材料参数识别过程的自动化。由于简化模型极大地降低了计算代价,采取“试错法”也能够较快得到满足要求的材料参数,为简单起见,此处采用“试错法”,完成材料参数识别。

建立图 5(a) 所示的简化多晶模型,结合 ZSGH4169 合金的实验数据^[36],根据参数对力学行为的影响对其进行调整,利用 ABAQUS 软件反复迭代运算,直至误差满足要求,得到了 ZSGH4169 在不同温度下的材料参数,仿真结果与实验结果对比情况如

图 11(a)所示。

将“柱晶纵向卸载”等效为“单晶<001>卸载”，利用 MATLAB 软件结合优化算法，根据误差可自动迭代调整八面体滑移系材料参数，可快速满足要求的材料参数；建立图 5(b)所示的模型，用于横向卸载情况下参数识别，调整立方滑移系材料参数，利用有限元软件迭代计算，直至仿真结果满足要求。若效果不好，则重新调整八面体滑移系材料参数，反复迭代几次。DZ125 仿真/实验结果^[36]如图 11(b),(c)。

将“简化的本构模型”与“数学优化算法”在 MATLAB 软件平台下实现集成，根据 DD6 合金<001>与<111>实验数据^[36]与仿真数据间的误差，自动迭代调整参数，可获得满足要求的材料参数，其仿真/计算结果如图 11(d),(e)。

图 11 中的计算结果为图 3(a)与图 5 中有限元模型所有积分点应力应变值的数值平均结果。图中所有仿真数据与实验数据之间的最大相对误差不超过 5%，可同时模拟定向凝固柱晶合金 L 方向与 T 方向的拉伸力学特性，也能够较为精确计算单晶合金<001>与<111>的力学响应，文中所开发的材料参数识别方法能够快速有效地识别晶体塑性模型中的材料参数。

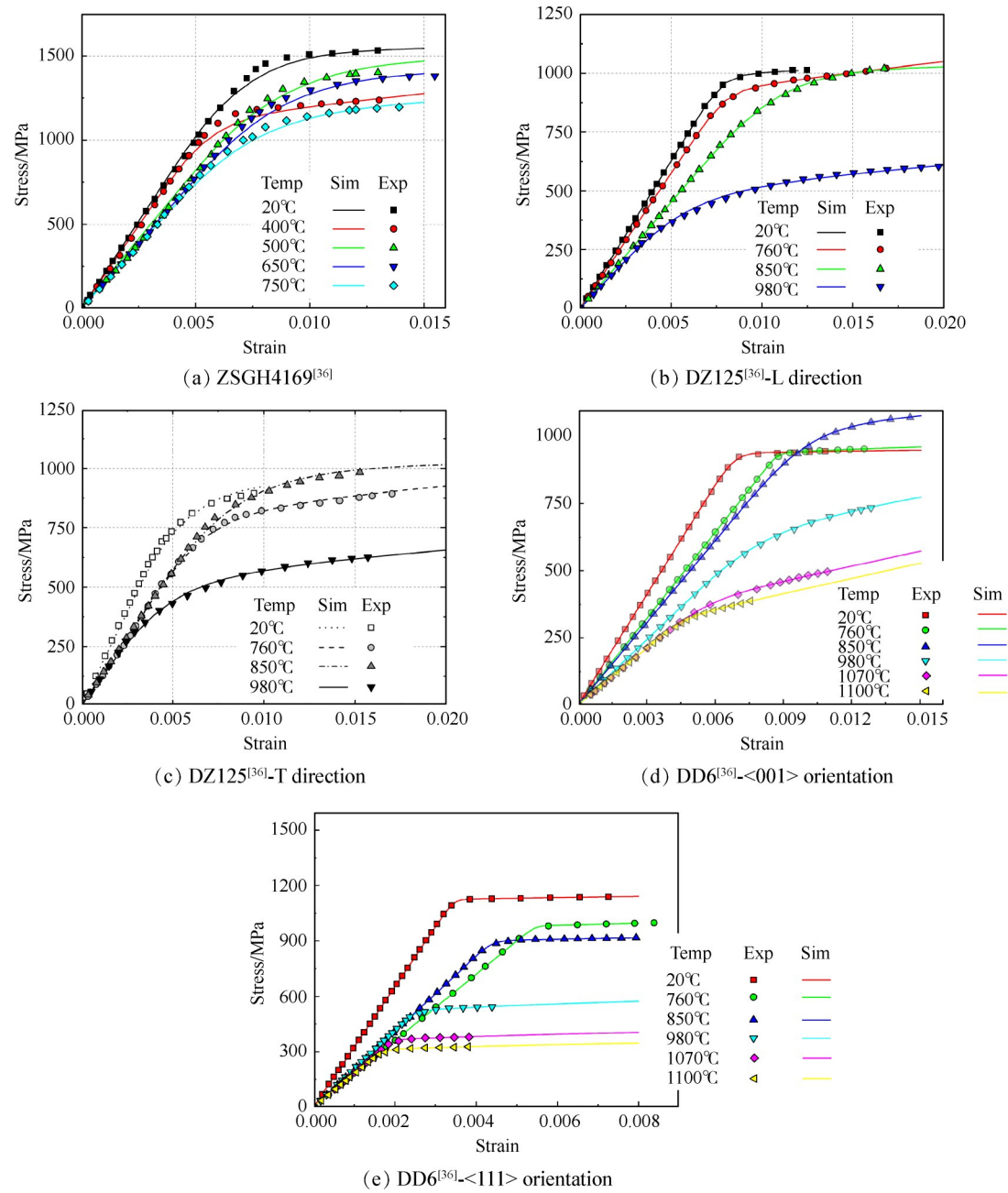


Fig. 11 Comparison of simulation and experiment results of ZSGH4169^[36], DZ125^[36] and DD6^[36] at different temperatures

4 结 论

本文通过研究,得到如下结论:

(1)完成了多晶/柱晶传统微结构模型的简化。在文中所采取的载荷与边界条件下,简化多晶/柱晶模型与传统模型的宏观拉伸力学性能计算结果基本一致,简化模型的计算成本远远低于传统模型,利用简化模型进行材料参数识别可极大地提高效率。可利用简化模型快速识别材料参数,将参数带入传统Voronoi“晶粒集合”模型,进而研究微结构对宏观力学性能的影响。

(2)探索了简化多晶/柱晶微结构模型的合理建模策略。在文中所采取的载荷与边界条件下,为确保简化模型的宏观力学性能合理且计算代价适中,需保证简化多晶模型大致含有125个晶粒,需保证简化柱晶模型大致含有25个晶粒,计算结果进一步验证表明:“柱晶合金纵向受载”与“单晶合金<001>受载”基本等效。

(3)建立了针对多晶、柱晶与单晶高温合金的晶体塑性模型材料参数识别方法。获得了多晶合金ZSGH4169、定向凝固柱晶合金DZ125与单晶合金DD6共15组材料参数,利用所得参数可精确模拟3类高温合金的拉伸力学特性,所开发材料参数识别方法较为简单有效,具有一定的实用性。

参考文献

- [1] 廉筱纯, 吴 虎. 航空发动机原理[M]. 西安: 西北工业大学出版社, 2005.
- [2] 石多奇, 隋天校, 王相平, 等. 单晶叶片取向相关的统一屈服强度分析方法及应用[J]. 航空动力学报, 2021, 36(2): 329-340.
- [3] 孙万超. 考虑应力集中和晶向的单晶叶片低周疲劳优化分析[J]. 推进技术, 2017, 38(5): 1123-1132. (SUN Wan-chao. LCF Optimization of Single Crystal Superalloy Blade Considering Stress Concentration and Crystallographic Orientation [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2017, 38(5): 1123-1132.)
- [4] 《航空涡喷、涡扇发动机结构设计准则(研究报告)》编委会. 航空涡喷、涡扇发动机结构设计准则(研究报告)第一册 总论[R]. 北京: 中国航空工业总公司发动机系统工程局, 1997.
- [5] 杨秦政, 杨晓光, 石多奇. 线搜索增强的率相关晶体塑性本构积分算法及数值实现[J]. 推进技术, 2022, 43(3): 200354. (YANG Qin-zheng, YANG Xiao-guang, SHI Duo-qi. Numerical Implement of Line Search Enhanced Integration Method of Rate-Dependent Crystal Plasticity Constitutive Law[J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2022, 43(3): 200354.)
- [6] 马显锋, 位东辉, Allison J E, 等. 核合金的基于晶体塑性模型的集成计算材料模拟研究[J]. 中国科学, 2019, 49(11): 114608.
- [7] Estrada R E A. Microstructure-Sensitive Creep-Fatigue Interaction Crystal-Viscoplasticity Model for Single-Crystal Nickel-Base Superalloys [D]. Atlanta: Georgia Institute of Technology, 2017.
- [8] 万建松. 基于有限变形晶体滑移理论的单晶力学行为及应用研究[D]. 西安: 西北工业大学, 2003.
- [9] 温志勋. 晶体塑性理论及其在镍基单晶和双晶合金中的应用[D]. 西安: 西北工业大学, 2007.
- [10] 梁建伟. 镍基单晶合金超温超载蠕变性能研究[D]. 西安: 西北工业大学, 2018.
- [11] 熊 骏, 李振环, 朱亚新, 等. 基于微结构动态演化机制的单晶镍基高温合金晶体塑性本构及其有限元模拟[J]. 力学学报, 2017, 49(4): 763-781.
- [12] HAN Shi-wei, YANG Xiao-guang, SHI Duo-qi, et al. A Reduced-Order Method for Parameter Identification of a Crystal Plasticity Model Considering Crystal Symmetry [J]. *Science China (Technological Sciences)*, 2019, 62(3): 373-387.
- [13] 王荣桥, 张 斌, 胡殿印. Ni₃Al基单晶高温合金蠕变本构模型[J]. 航空动力学报, 2018, 33(3): 657-662.
- [14] HAN Song-lin, Li Shu-xin, Smith D J. Comparison of Phenomenological and Crystallographic Models for Single Crystal Nickel Base Superalloys. I. Analytical Identification [J]. *Mechanics of Materials*, 2001, 33: 251-266.
- [15] MacLachlan D W, Knowles D M. The Effect of Material Behavior on the Analysis of Single Crystal Turbine Blades: Part I—Material Model [J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2002, 25: 385-398.
- [16] Staroselsky A, Cassenti B N. Creep, Plasticity, and Fatigue of Single Crystal Superalloy [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2011, 48: 2060-2075.
- [17] Estrada R E A, Neu R W. Crystal Viscoplasticity Model for the Creep-Fatigue Interactions in Single-Crystal Ni-Base Superalloy CMSX-8 [J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 100: 14-33.
- [18] 张宏建. IC10合金的力学性能试验及本构模型研究[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2009.
- [19] 周 杰. 镍基金属间化合物IC10合金的变形机制及本构模型研究[D]. 南京: 南京航空航天大学, 2016.
- [20] Shenoy M M, Gordon A P, McDowell D L, et al. Thermomechanical Fatigue Behavior of a Directionally Solidified Ni-Base Superalloy [J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2005, 127: 325-336.
- [21] Sai K, Cailletaud G, Forest S. Micro-Mechanical Model-

- ing of the Inelastic Behavior of Directionally Solidified Materials [J]. *Mechanics of Materials*, 2006, 38: 203–217.
- [22] Martin G, Ochoa N, Sai K, et al. A Multiscale Model for the Elastoviscoplastic Behavior of Directionally Solidified Alloys: Application to FE Structural Computations [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2014, 51: 1175–1187.
- [23] Coudon F, Cailletaud G, Cormier J, et al. A Multiscale Model for Nickel-Based Directionally Solidified Materials [J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, 115: 1–17.
- [24] 张静, 张克实, 许凌波. 考虑尺寸效应的多晶金属循环塑性分析[J]. *固体力学学报*, 2012, 33(3): 233–241.
- [25] 石车嗣. 基于表面显微形貌的金属疲劳损伤表征及寿命预测方法[D]. 南宁: 广西大学, 2020.
- [26] 蔚夺魁, 杨晓光, 张克实. ZSGH4169合金细观力学行为的数值模拟[J]. *航空动力学报*, 2013, 28(11): 2572–2578.
- [27] 杨晓光, 苗国磊, 韩世伟, 等. 载荷水平对HCF寿命分散性影响的有限元模拟[J]. *航空动力学报*, 2016, 31(12): 2928–2932.
- [28] HAN Shi-wei, YANG Xiao-guang, SHI Duo-qi, et al. Microstructure-Sensitive Modeling of Competing Failure Mode Between Surface and Internal Nucleation in High Cycle Fatigue [J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 126(10).
- [29] Wan V V C, Jiang J, MacLachlan D W, et al. Microstructure-Sensitive Fatigue Crack Nucleation in a Polycrystalline Ni Superalloy [J]. *International Journal of Fatigue*, 2016, 90: 181–190.
- [30] Park T, Hector Jr L G, Hu X, et al. Crystal Plasticity Modeling of 3rd Generation Multi-Phase AHSS with Martensitic Transformation [J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, 120: 1–46.
- [31] Asaro R J, Lubarda V A. *Mechanics of Solids and Materials* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2006.
- [32] 黄克智, 黄永刚. 固体本构关系 [M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
- [33] Roters F, Eisenlohr P, Bieler T R, et al. *Crystal Plasticity Finite Element Methods* [M]. Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2010.
- [34] Dai H J, Gebelin J C, Newell M, et al. Grain Selection During Solidification in Spiral Grain Selector [C]. Warrendale: *Superalloys* 2008, 2008.
- [35] 周衍柏. 理论力学教程 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2020.
- [36] 《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(第四册) [M]. 北京: 航空工业出版社, 2010.

(编辑:梅 瑛)