

基于多晶体塑性与唯象学本构模型的纯铝与单晶铝的有限变形分析与对比

侯 帅，朱有利，王燕礼，孙寒骁

(装甲兵工程学院，北京 100072)

摘 要：多晶体塑性模型能够反映材料的微观结构和各种力学响应，但是模型复杂，本构积分计算量大，而唯象学弹塑性本构模型相对简单，但是基于变形率张量弹塑性加法分解的唯象学弹塑性本构模型又不能反映材料的微结构发展演化，在大变形时会产生差别。分别采用以上 2 种本构模型对纯铝和单晶铝的有限变形单向拉伸过程进行了计算分析，比较了 2 种模型在不同变形量下计算结果的差别。结果表明，纯铝唯象学弹塑性本构模型在真应变超过 25.5% 时，应力应变曲线开始出现差别，且随应变的增加而增大。多晶体塑性模型能够从变形、织构和残余应力等方面反映纯铝和单晶铝大变形产生的各向异性。

关键词：多晶体塑性；本构关系；纯铝；单晶铝；有限单元法；单向拉伸

中图分类号：TG146.2⁺1；O344

文献标识码：A

文章编号：1002-185X(2017)12-3760-07

基于变形率张量弹塑性加法分解的唯象学弹塑性本构模型在有限变形弹塑性分析时会带来误差，而且这种弹塑性分解方法也缺乏明确的物理机制^[1]。实际上，材料的力学性能在很大程度上由材料的微观组织结构及其发展演化决定，建立在材料塑形变形物理机制基础上的多晶体塑性本构模型（CPFEM）能够反映材料的微观结构各向异性响应^[2,3]，尤其是模拟变形织构的演化^[4,5]。特别是随着弹塑性有限变形有限元理论的不断发展和成熟，金属材料的多晶体塑性本构模型已在金属塑性成形领域得到了较多的研究与应用^[6,7]，但由于多晶体塑性本构模型及其数值积分算法十分复杂，使得采用基于多晶体本构模型的大变形有限元建模分析在模拟实际工程问题时会遇到计算工作量大，占用计算机资源多和总计算时间太长的困难。

分别采用基于变形梯度张量弹塑性乘法分解和晶体塑形理论的本构模型，以及基于变形率张量弹塑性加法分解和基于各向同性强化 J2 流动理论的唯象学本构模型，对纯铝试件与单晶铝试件的单向拉伸过程进行有限变形弹塑性有限元分析，研究了变形量对唯象学弹塑性本构模型计算误差的影响规律，并分析讨论了唯象学弹塑性本构模型所适用的变形量范围。为在开展金属塑性成形有限元建模仿真时选择恰当的本构模型提供依据。

1 晶体塑性本构关系

1.1 晶体塑性变形几何学与运动学

传统的唯象学弹塑性本构模型中关于材料弹塑性的运动分解是变形率张量的加法分解理论，这实际上是小变形无限小应变弹塑性理论的直接推广，但是，Lee 基于晶体塑性变形的物理机制提出了变形梯度张量的弹塑性乘法分解理论^[1]，假定塑性变形只与晶体学位错滑移有关，不考虑由耗散、孪晶和晶界滑移引起的形变，那么在发生塑性变形时，可以将单晶体总的变形梯度张量 F 分解为弹性变形梯度 F^e 和塑性变形梯度 F^p 的积：

$$F = F^e F^p \quad (1)$$

根据张量极分解定理，弹性变形梯度张量又可分解为左弹性伸长张量 V^e 与旋转张量 R^e 的积：

$$F^e = V^e R^e \quad (2)$$

引入如下关系：

$$F^* = R^e F^p \quad (3)$$

那么，变形梯度张量可表示为：

$$F = V^e F^* \quad (4)$$

F^p 的物理意义是晶体位错（塑性滑移）沿着晶体学平面（滑移面）运动（均匀剪切）所对应的变形梯度， F^e 的物理意义是弹性变形（即晶格畸变）和刚体转

动所产生的变形梯度， V^e 代表了纯弹性伸长，因此， F^* 包含了塑性变形和转动。以 B_0 为参考构型， B 为当前构型，那么式 (1) ~ (4) 引入 2 个中间构型 \bar{B} 和 \hat{B} ，如图 1 所示。假定晶体的弹性性能不受滑移的影响，那么应力只由 F^e 决定。

在小弹性应变的假设下（在金属材料有限弹塑性变形情况下，弹性变形一般远远小于塑性变形^[8]），中间卸载构型中 \hat{B} 的单晶体本构模型可表示为^[9]：

运动学：

$$d = \overset{\nabla}{\varepsilon}^e + \hat{D}^p, \quad \overset{\nabla}{\varepsilon}^e = \overset{\nabla}{\varepsilon} + \varepsilon^e \hat{\mathcal{L}}^e - \hat{\mathcal{L}}^e \varepsilon^e \quad (5)$$

$$w = -\text{skew}(\overset{\nabla}{\varepsilon} \varepsilon^e) + \hat{\mathcal{L}}^e + \hat{W}^p, \quad \hat{\mathcal{L}}^e = \hat{R}^e R^{eT} \quad (6)$$

$$\text{弹性: } \tau = \hat{\mathcal{C}}^e : \varepsilon^e \quad (7)$$

$$\text{塑性: } \hat{D}^p = R^e \bar{D}^p R^{eT} = \sum_{\alpha=1}^N \gamma_{\alpha} \text{sym}(\hat{Z}^{\alpha}) \quad (8)$$

$$\hat{W}^p = R^e \bar{W}^p R^{eT} = \sum_{\alpha=1}^N \gamma_{\alpha} \text{skew}(\hat{Z}^{\alpha}) \quad (9)$$

$$\gamma_{\alpha} = \Phi(\tau^{\alpha}, k_s^{\alpha}) \quad (10)$$

$$\tau^{\alpha} = \tau : \text{sym}(\hat{Z}^{\alpha}) = \tau : \hat{Z}^{\alpha} \quad (11)$$

$$k_s^{\alpha} = \Theta(\tau^{\alpha}, k_s^{\alpha}) \quad (12)$$

式 (5) ~ 式 (6) 为运动学关系： d 为变形率张量，

$\overset{\nabla}{\varepsilon}^e$ 为 Green-McInnis-Naghdi 客观应变变化率， \hat{D}^p 为变形率张量塑性部分， ε^e 为弹性格林应变张量， $\hat{\mathcal{L}}^e$ 为相对旋率张量，代表了晶格的转动， w 为旋率张量（速度梯度张量的反对称部分）。

式 (7) 为弹性本构关系： τ 为第 2 类 Piola-Kirchhoff 应力张量， $\hat{\mathcal{C}}^e$ 为四阶各向异性弹性张量。

式 (8) ~ 式 (12) 为塑性本构关系： γ_{α} 表示在第 α 个滑移系的塑性剪切率， τ^{α} 为第 α 个滑移系的分切应力， \hat{Z}^{α} 为 Schmid 张量， $\hat{Z}^{\alpha} = \mathcal{S}^{\alpha} \otimes m^{\alpha}$ ， \mathcal{S}^{α} 是在 \hat{B} 构型下第 α 个滑移系的滑移方向矢量， m^{α} 是在 \hat{B} 构型下第 α 个滑移系的滑移面法向矢量，通过 \hat{Z}^{α} 建立

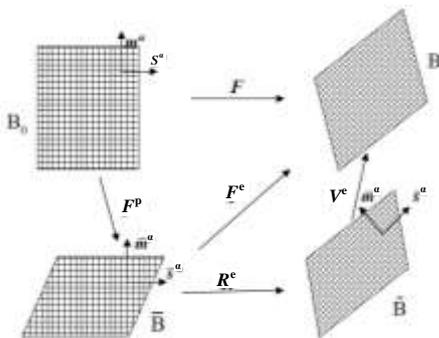


图 1 单晶体的弹塑性变形运动学分解示意图

Fig. 1 Kinematics and decomposition of elastoplastic deformation of single crystals

起了整体的塑性变形与各滑移系中由滑移引起的剪切应变的关系。

1.2 流动准则

公式 (10) 为流动准则一般形式，目前常用的流动准则有 2 种，即率相关和率无关准则^[10]。采用了率相关准则，该流动准则中剪切应变率和分解剪应力具有幂指数的函数关系^[11]：

$$\gamma_{\alpha} = \gamma_{\alpha}^0 \left(\frac{\tau^{\alpha}}{k_s^{\alpha}} \right)^{1/m} \text{sign}(\tau^{\alpha}) \quad (13)$$

γ_{α} 为滑移系塑性剪切应变率， γ_{α}^0 为参考剪切应变率，函数 k_s^{α} 为临界分解剪切应力， τ^{α} 为作用在第 α 滑移系上的分切应力， sign 为符号函数， m 为应变率敏感系数^[12]。

1.3 硬化准则

为描述材料的应变硬化特征，采用了由 Voce 和 Kocks 的硬化模型，并假设所有滑移系的硬化率相同^[13]：

$$k_s^{\alpha} = h_0 \left(\frac{k_{s,s} - k_{s,0}^{\alpha}}{k_{s,s} - k_{s,0}^{\alpha}} \right) \sum_{\alpha=1}^N \gamma_{\alpha} \quad (14)$$

其中， h_0 为初始硬化模量， $k_{s,0}$ 为作用在滑移系上的初始分解剪切应力， $k_{s,s}$ 为饱和分解剪切应力，由文献[14]给出：

$$k_{s,s} = k_{s,s0} \left(\sum_{\alpha} \gamma_{\alpha} / \gamma_{s0} \right)^m \quad (15)$$

式中的 $k_{s,s0}$ 、 m 为材料参数。

2 纯铝和单晶铝单向拉伸的 CPFEM 模型

通过用户材料子程序接口 (UMAT)，将材料位错运动的本构关系赋予 ABAQUS 的 C3D8R 单元^[15]，引入多晶体塑性本构模型。

多晶体塑性本构关系中，根据单元尺度和晶粒尺度的相对大小以及初始织构给每个单元积分点分配合适数量的晶体取向，然后在单元积分点上采用扩展的 Taylor^[16]均匀变形假设，单元之间采用有限元方法计算其弹性约束。本文建立了包含 512 个晶粒的多晶体模型，初始晶粒取向如图 4a 所示，单晶体铝晶粒取向给定欧拉角为 (54.70°, 90.00°, 45.00°) 或用 Miller 指数表示为 {110}<112>。模型尺寸为 0.5×0.5×0.5 mm³，有限元模型如图 2 所示。

边界条件如下：后侧面 ($z=0$) $U_x=U_y=U_z=0$ ，前侧面 ($z=0.5$ mm) 施加沿 z 轴的节点位移 ($U_z=0.3$ mm，伸长量 60%)，其它侧面为自由表面。

材料参数：fcc 晶体滑移系为 {111}<110>。对于立方晶体，四阶弹性张量可由 3 个独立分量表示，即材料弹性常数 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 。表 1 纯铝^[17]和单晶铝的多晶体塑性本构参数^[9]。

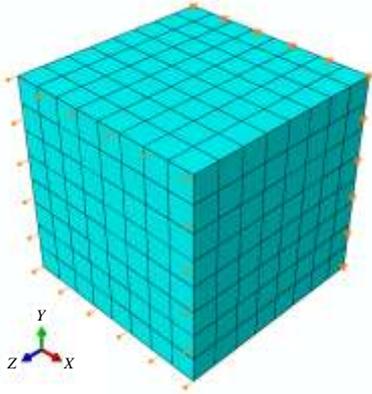


图 2 单向拉伸有限元模型网格划分及边界条件

Fig. 2 Meshing and boundary conditions of the uniaxial tension FEM model

为进行对比分析，利用以上晶体塑性有限元模型

表 1 纯铝和铝单晶的材料参数

Table 1 Material parameters of pure aluminium^[17] and aluminium single crystal^[9]

Material	C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	m	$\dot{\gamma}_0/s^{-1}$	h_0/MPa	$k_{s,0}/\text{MPa}$	$k_{s,s0}/\text{MPa}$	m'	$\dot{\gamma}_{s,0}/s^{-1}$
Pure Al	108.2	61.3	25.8	0.01	1.0	58.48	27.17	61.8	0.005	5×10^{10}
Single crystal Al	108.2	61.3	28.5	0.01	1×10^{-3}	28.4	3.7	37.8	5×10^{-4}	5×10^{10}

$$\sigma_{\text{true}} = \frac{F}{A} = \frac{F}{A_0 \frac{l_0}{l}} = \frac{F}{A_0} \left(1 + \frac{\Delta l}{l_0}\right) \quad (17)$$

式中， l_0 为试件初始长度， Δl 为伸长量， l 为当前长度， F 为拉伸载荷， A_0 为初始截面积， A 为变形后截面积。

图 3a 为采用两种模型计算获得的纯铝单向拉伸伸长 60% 的真应力-真应变曲线。可见，在弹性阶两种模型对应力-应变曲线的计算结果基本吻合。在真应变较小时 (<25.5%) 差别较小，但当真应变超过 25.5% 时，2 种模型的计算结果开始逐渐产生较大的差别，真应力差 ($\sigma_{J2} - \sigma_{\text{CPFEM}}$) 最大值达到 61 MPa，且呈现非单调变化 (图 3b)。这种非单调性主要是由于单向拉伸变形时，作用于各晶粒的滑移系上的分切应力因晶粒取向不同相差较大，滑移系的开动有难易和先后，且需满足变形协调要求，而且各晶粒的转动也不同所造成的。这也表明多晶体塑性模型反映了形变的不均匀性。

取向各不相同的晶粒所组成的多晶体发生变形时，因晶粒转动会形成“择优取向”^[18,19]，形成变形织构，多晶体塑性模型可以计算这种变形织构的演化。图 4 是纯铝单向拉伸前后的极图，可见纯铝由弱 {110}<112> 黄铜织构和弱 {110}<001> 高斯织构 (图 4a，最大极密度为 2.2) 转变为强 {112}<111> 铜型织构 (图 4b)，极密度增大到 4.0。表明，因大塑性变形产生了较强的形变织构，在颈缩阶段表现出形变的各

计算得到的应力应变参数，在相同加载条件下采用唯象学本构模型进行了有限元分析。

3 本构关系计算结果与分析

3.1 纯铝单向拉伸结果分析

3.1.1 纯铝单向拉伸应力应变曲线与形变织构分析

通过单向拉伸计算可得到名义应变、名义应力、真应变和真应力。在有限应变问题中，试件截面积会减小，此时，应比较真应力。

真应变 (对数应变) 为:

$$\epsilon_{\text{true}} = \int_{l_0}^l \frac{dl}{l_0} = \ln\left(1 + \frac{\Delta l}{l_0}\right) \quad (16)$$

真应力为:

向异性。因此纯铝在考虑制耳、皱折、失稳等非均匀形变现象时，应采用多晶体塑性模型来进行成形过程的计算分析。

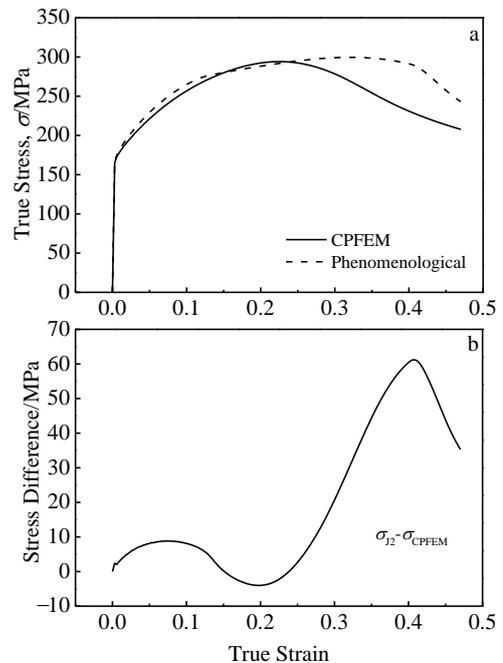


图 3 多晶体塑性模型和唯象学本构模型的纯铝单向拉伸计算结果

Fig. 3 Results of pure aluminium calculated by CPFEM and phe-

nomenological constitutive model: (a) true stress-true strain curves and (b) true stress difference of two models

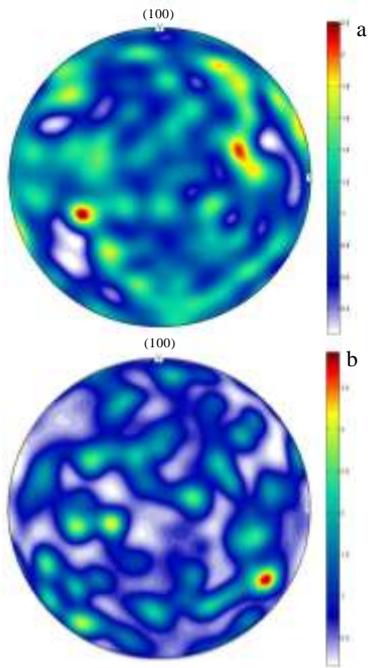


图 4 纯铝金单向拉伸前后 {100} 极图

Fig. 4 {100} pole figure of pure aluminium before and after uniaxial tension: (a) initial texture and (b) texture after uniaxial tension

3.2 单晶铝单向拉伸计算结果分析

3.2.1 单晶铝单向拉伸应力应变曲线分析

图 8a 为 2 种模型计算得到的单晶铝单向拉伸应力应变曲线, 可见, 在弹性阶段两种模型对应力-应变曲

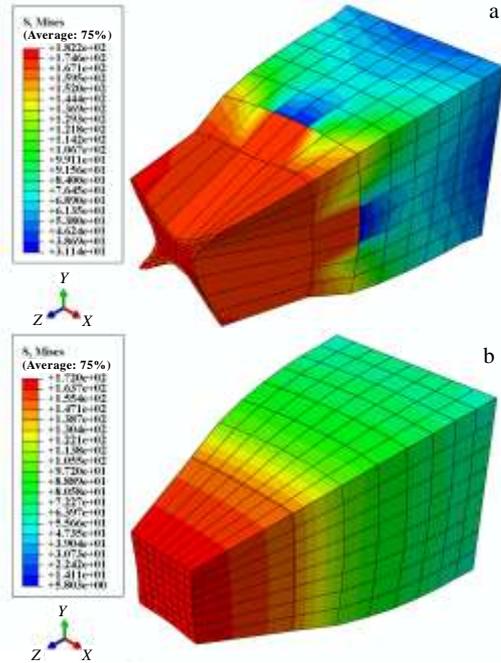


图 5 不同本构模型预测的纯铝单向拉伸后 Mises 等效应力分布云图及变形

Fig. 5 Mises stress contour and deformation predicted by different models of pure aluminium after uniaxial tension: (a) polycrystal plasticity model and (b) phenomenological model

3.1.2 单向拉伸变形分析

图 5a 和 5b 是分别采用多晶体塑性本构模型和唯象学本构模型计算得到的伸长量为 60% 时试件的变形图及 Mises 等效应力分布图。可见, 2 种模型均预测了颈缩现象, 但是 CPFEM 计算结果显示出颈缩区具有明显的宏观各向异性和塑性局部化, 而唯象学模型预测的颈缩区变形较为均匀。颈缩区剪应变相差较大, CPFEM 计算的最大剪应变为 0.69 (图 6a), 而唯象学模型的结果为 0.21 (图 6b)。这是由于 CPFEM 模型中金属晶体中一部分相对另一部分沿滑移面和滑移方向产生了剪切变形, 而唯象学模型并未考虑位错滑移所造成的微观结构变化。

3.1.3 纯铝单向拉伸卸载后残余应力分析

2 种模型计算的纯铝单向拉伸卸载后的残余应力如图 7a、7b 所示, 可见, 残余应力分布有较大区别, 特别是颈缩区, CPFEM 计算的应力区间较大 (3.99~67.6 MPa), 且颈缩区不均匀塑性变形较大, 因而残余拉应力较大 (~35 MPa), 唯象学模型颈缩区应力区间较小 (5.2~47.2 MPa), 且残余拉应力较小 (~11 MPa)。

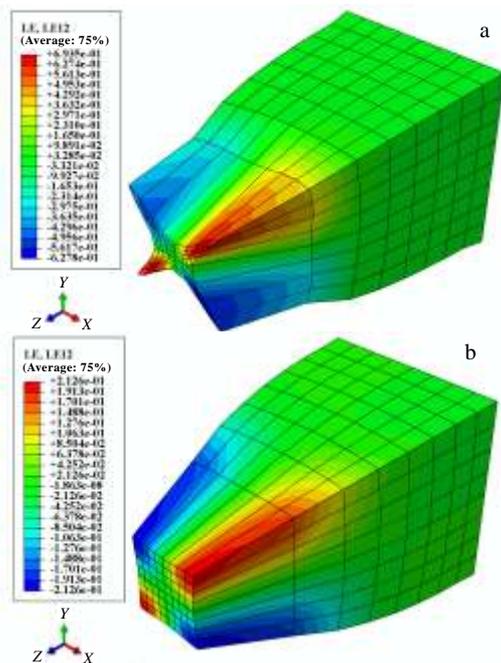


图 6 不同本构模型预测的纯铝单向拉伸后 XY 剪应变分布云图

Fig.6 XY shearing strain contour predicted by different models of pure aluminium after uniaxial tension: (a) polycrystal plasticity model and (b) phenomenological model

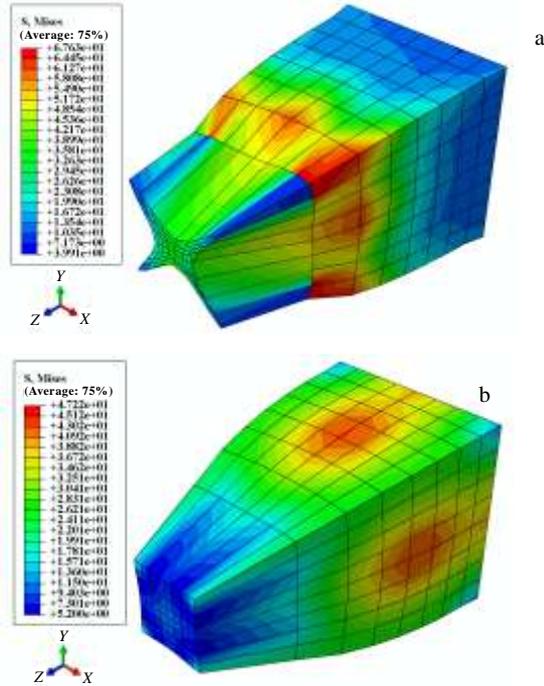


图 7 纯铝单向拉伸卸载后 Mises 应力分布云图

Fig.7 Mises stress distribution contour of pure aluminium after uniaxial tension and unloading: (a) polycrystal plasticity model and (b) phenomenological model

线的计算结果基本吻合。真应变超过屈服点后的真应力差 ($\sigma_{J_2} - \sigma_{CPFEM}$) 变化较小 (5 MPa 内), 当真应变超过 35% 时, 两种模型预测的真应力-真应变曲线开始产生较大差别, 真应力差 ($\sigma_{J_2} - \sigma_{CPFEM}$) 最大为 24 MPa。与纯铝的应变误差曲线一样, 真应变误差曲线也具有非单调性。

3.2.2 单晶铝单向拉伸变形分析

图 9a 是单晶铝拉伸变形的 CPFEM 计算结果, 由于加载方向与晶粒取向存在角度差, 拉伸变形使单晶铝产生了一定程度的转动。单晶铝从初始取向欧拉角 (54.70°, 90.00°, 45.00°) 转变为 (54.80°, 90.73°, 41.85°), 相当于绕 [2513] 晶轴旋转了 3.2°, 有带状的分布区域, 表现出塑性局部化。这种冷变形过程中的晶粒转动会产生剪切带^[20], 而基于唯象学本构关系的模型未发生扭转变形 (图 9b)。CPFEM 计算得到最大剪应变为 0.8 (图 10a), 而唯象学模型仅为 0.06 (图 10b), 这进一

步表明晶体塑性模型可反映晶体取向与晶粒转动对材料性能的影响。

3.2.3 单晶铝单向拉伸残余应力分析

如图 11a 所示, CPFEM 模型计算的单晶铝拉伸卸载后残余应力分布不均匀, 前侧面有带状高应力区域, 而唯象学模型计算得到的残余应力分布相对均匀 (图

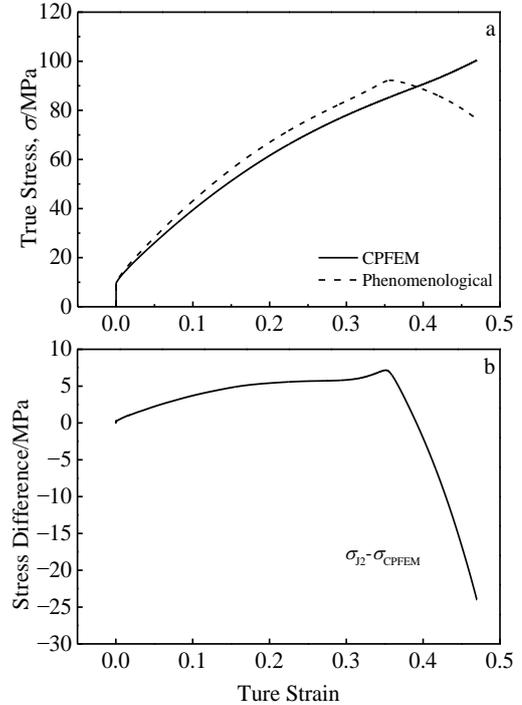


图 8 多晶体塑性模型和唯象学本构模型的单晶铝单向拉伸计算结果

Fig.8 Results of single crystal aluminium calculated by CPFEM and phenomenological constitutive model: (a) true stress-true strain curves and (b) true stress difference of two models

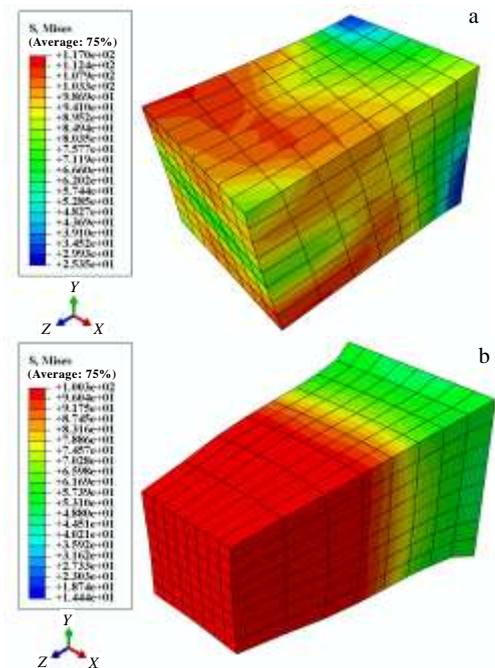


图 9 不同本构模型预测的 Mises 等效应力分布云图及变形
 Fig.9 Mises stress contour and deformation predicted by different models of a single crystal aluminium after uniaxial tension: (a) crystal plasticity model and (b) phenomenological model

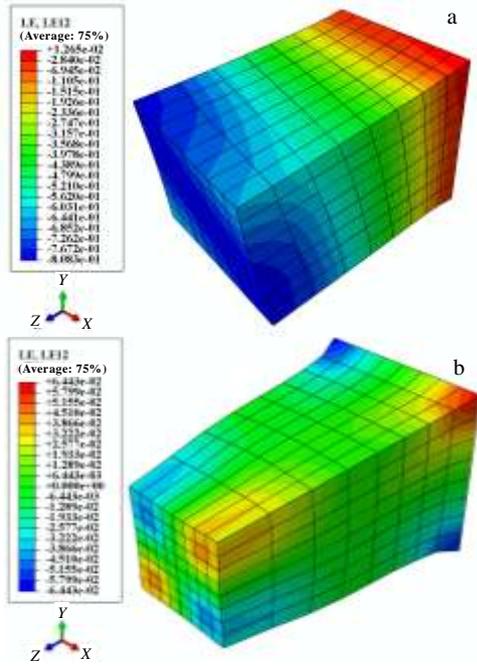


图 10 不同本构模型预测的单晶铝单向拉伸后 XY 剪应变分布云图
 Fig.10 XY shearing strain contour predicted by different models of a single crystal aluminium after uniaxial tension: (a) polycrystal plasticity model and (b) phenomenological model

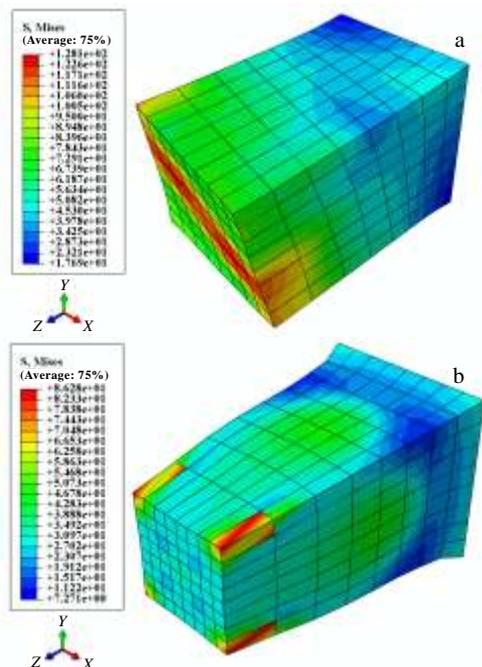


图 11 单晶铝单向拉伸卸载后 Mises 应力分布云图
 Fig.11 Mises stress distribution contour of a single crystal aluminium after uniaxial tension and unloading: (a) polycrystal plasticity model and (b) phenomenological model

11b), 这进一步说明微观结构对应力的影响, 单晶体塑性变形只与内部位错滑移有关, 随着滑移变形量的增加, 部分区域位错密度不断增大, 产生位错强化, 形成高应力区。非均匀变形产生的非均匀微观残余应力会使金属的塑性、冲击韧性和疲劳强度降低, 在金属塑形成形中会产生形状和尺寸非均匀变化如制耳、皱折、失稳等^[21]。

4 结 论

1) 采用有限单元法计算了纯铝与单晶铝的单向拉伸过程。在弹性阶段基于变形梯度张量弹塑性乘法分解的多晶体塑性模型和基于变形率张量弹塑性加法分解的 J2 流动理论本构模型对真应力-真应变曲线的计算结果基本吻合。

2) 纯铝单向拉伸计算中, 当真应变超过 25.5%时 (颈缩开始), 2 种模型预测的真应力-真应变曲线开始产生差别, 真应力差最大值达到 61 MPa。单晶铝单向拉伸计算中, 真应变超过 35%时, 2 种模型预测的真应力-真应变曲线开始产生差别, 真应力差最大为 24 MPa。

3) 采用基于变形梯度张量弹塑性乘法分解的多晶体塑性本构模型可以预测金属材料弹塑性有限变形中形变织构的发展演化以及微观残余应力分布。

参考文献 References

[1] Lee E H. *ASME J Appl Mech*[J], 1969, 36: 1
 [2] Jia N, Raabe D, Zhao X. *Acta Materialia*[J], 2016, 111(1): 116
 [3] Wu Yurui, Shen Yao, Wu Peidong et al. *International Journal of Solids and Structures*[J], 2016, 96(1): 265
 [4] Jia N, Roters F, Eisenlohr P. *Acta Materialia*[J], 2013, 61: 4591
 [5] Eidel B. *Acta Materialia*[J], 2011, 59: 1761
 [6] Zhu Youli(朱有利), Kang Yonglin(康永林), Ding Huadong(丁华东) et al. *Journal of Armored Force Engineering Institute (装甲兵工程学院学报)*[J], 2003, 17(1): 5
 [7] Jung K H, Kim D K, Im Y T et al. *Materials Transactions*[J], 2013, 54(5): 769
 [8] Marin E B, Dawson P R. *Comput Methods Appl Mech Eng*[J],

- 1998, 165: 1
- [9] Marin E B. *On the Formulation of a Crystal Plastic Model*[R]. Lawrence Livermore, CA: Sandia National Laboratories, 2006
- [10] Meyers M A, Vohringer O, Kad B K *et al.* *Material Science and Engineering A*[J], 2002, 322: 194
- [11] Hutchinson J W. *Proc R Soc Lond A*[J], 1976, 348: 101
- [12] Kothri M, Anand L. *J Mech Phys Solids*[J], 1998, 46: 51
- [13] Mechking H, Cocks U F. *Acta Materialia*[J], 1981, 29: 1865
- [14] Follasbe P S, Kocks U F. *Acta Materialia* [J], 1988, 36: 81
- [15] Dassult Simulia Inc. *Abaqus Analysis User's Manual*[M]. Rhode Island: Abaqus Software, 2013
- [16] Li H W, Yang H. *Computational Materials Science*[J], 2012, 54: 255
- [17] Mathur K K, Dawson P R. *International Journal of Plasticity* [J], 1989, 5(1): 67
- [18] Wang Zhiqiang(王自强), Zhu Duanping(祝段平). *Plastic Mesoscopic Mechanics*(塑性细观力学)[M]. Beijing: Science Press, 1995
- [19] Kim D K, Kim J M, Park W W *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2015, 100: 52
- [20] Teplyakova L A, Beshpalova I V, Lychangin D V. *Physical Mesomechanics*[J], 2009(3-4): 166
- [21] Dixit N, Xie K Y, Hemker K J *et al.* *Acta Materialia*[J], 2015, 87: 56

Analysis and Comparison of Finite Deformation of Pure Aluminium and Single Crystal Aluminium Based on Polycrystal Plasticity and Phenomenological Constitutive Models

Hou Shuai, Zhu Youli, Wang Yanli, Sun Hanxiao

(Academy of Armored Force Engineering, Beijing 100072, China)

Abstract: Polycrystal plasticity model can reflect the material's microstructure and various mechanical response, but it is too complicated for great computation. The phenomenological elastoplastic constitutive model is relatively simple, as yet phenomenological elastoplastic constitutive model under the condition of large deformation will cause difference based on the additive decomposition of deformation rate tensor. In this paper, the uniaxial tensile test process of pure aluminium and single crystal aluminium were calculated based on the polycrystal plasticity finite deformation elastoplastic finite element method (CPFEM) and phenomenological elastoplastic constitutive model, and the differences of two models was compared. The results show that the true stress-true strain curves of pure aluminium calculated by the two models are different when true strain exceeds 25.5%, and the difference increases with increasing of strain. Polycrystal plasticity model reflects the anisotropy of deformation, texture and residual stress during large deformation of pure aluminium and single crystal aluminium.

Key words: polycrystal plasticity; constitutive relation; pure aluminium; single crystal aluminium; finite element method; uniaxial tension

Corresponding author: Zhu Youli, Ph. D., Professor, Faculty of Equipment Maintenance and Remanufacturing Engineering, Academy of Armored Force Engineering, Beijing 100072, P. R. China, Tel: 0086-10-66717168, E-mail: zhuy2011@sina.com