

多晶金属材料的三维组集式 弹塑性本构模型

梁乃刚

程品三

(中国科学院力学研究所) (中国科学院力学研究所非线性连续介质力学开放研究实验室)

摘要 本文从分析多晶金属材料的细观组织在弹塑性变形中的贮能和耗能机制入手, 提出一个三维组集式弹塑性本构模型。该模型将材料单元抽象成沿三维空间各方向均匀分布组件的集合体, 方向组件反映材料的细观性态并在宏观上协调变形, 所有方向组件的内力总效应构成宏观应力。文中导出了显式的弹塑性本构关系, 并与 Budiansky^[1] 的复杂加载试验结果及其它塑性模型进行了对比。

关键词 体积势, 喷变势, 弹塑性, 本构关系, 三维组集模型

一、引言

多晶金属材料的弹塑性本构关系是固体力学和材料科学中的一个重要课题, 许多学者对此进行了大量的研究。

Taylor^[2] (1938) 最早以单晶体的塑性变形推导多晶体的塑性性质。他假定各晶体均为均匀变形的刚塑性体, 宏观应变等于晶体应变, 利用 Schmid 分解剪应力滑移定理和能量原理导出宏观应力反应。Lin^[3] (1957) 将 Taylor 的刚塑性晶体修改成弹塑性晶体, 导出多晶体的弹塑性本构关系。Kroner^[4] (1961)、Budiansky 和 Wu^[5] (1962) 提出多晶体弹塑性本构关系的自洽理论。他们定义宏观应力应变为晶体应力应变的平均值, 把晶体处理成无限大弹性体中的椭圆夹杂, 利用 Eshelby (1957) 的夹杂理论给出宏观应力场与晶体变形的关系。Lin^[6-9] (1971、1974、1981、1984) 把晶体处理成可以在三维空间延拓的立方体, 以立方晶体中心的应力应变代表宏观应力应变, 运用等效体力方法和宏观单向多晶体拉伸应力应变曲线, 确定晶体受三维空间均匀分布的 $3 \times 3 \times 3$ 或 $4 \times 4 \times 4$ 个晶体弹塑性变形作用下的应力应变关系, 把物理塑性理论的实用化大大推进了一步。

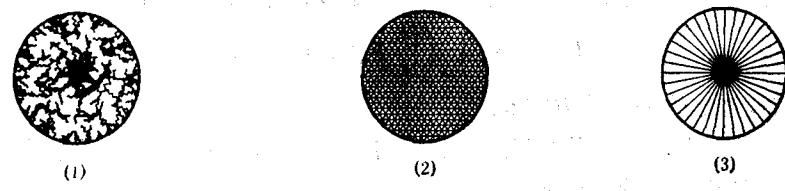
从晶体滑移来研究金属的塑性变形, 利用了塑性变形的细观物理机制, 不必象数学塑性理论那样去描述变化规律非常复杂的后继屈服面, 为解决复杂加载条件下的材料本构关系提供了一条新的途径。但是, 目前物理塑性理论中仍存在着一些令人困惑的问题。单晶体中各滑移系间的强化规律尚在探索^[10,11], 单晶到多晶过渡中的许多简化和统计平均处理还值得商榷, 多晶中晶界和缺陷对塑性性质的重要影响^[12]还有待于研究, 大量复杂的数值计算不便于实际应用等。

本文提出一种多晶金属材料的弹塑性本构模型。这个模型从晶体在弹塑性变形中的

能量特性出发，将晶体简化成三维空间取向、均匀分布的一维组件的集合体，利用各方向上组件宏观协调变形时的内力导出宏观应力反应。各方向组件的变形力学规律由多晶体材料单向变形应力应变实验关系确定。避开了讨论各细观结构在弹塑性变形中的复杂运动机制，从而导出了较为简洁的弹塑性本构关系。

二、三维组集模型与弹塑性本构关系

在细观尺度上，宏观材料单元是单晶、晶界和缺陷等细观结构的集合体。各细观组份具有一定的三维拓扑构造，并随材料的宏观变形而发生畸变与相互错动。晶体的畸变是其点阵上原子间的相对距离变形而形成的。这是距离变化一般是弹性形变，伴随着体积变化。细观结构内部和相邻结构间的相互错动不产生体积变形，但引起能量的消耗。假定把每一个可能的运动机制在宏观材料单元变形时的贮能与耗能用一根等效的弹塑性杆件代替，则宏观材料单元就可以简化成如图1-1所示的在三维空间中随机取向的分布的弹塑性杆件集合体。



能量等价的随机分布微杆件 模型化均匀取向的分布微杆件 离散化的方向组件
图1 模型的构造

显然，宏观材料单元的体积应变能应当等于产生体积变形的运动机制所对应的杆件应变能之和。由于这种变形能是弹性的，因而

$$U_s = \frac{1}{2} K t_r^2(\epsilon) \quad (1)$$

其中： U_s 为单元的体积变形能， K 为体积弹性模量， ϵ 为宏观应变张量， $t_r(\epsilon)$ 为 ϵ 的迹。

记对应于错动机制的杆件总贮能和耗能为 U_d ，则材料单元的总变形能

$$U = \frac{1}{2} K t_r^2(\epsilon) + U_d(\epsilon) \quad (2)$$

$\epsilon = \epsilon - \frac{1}{3} t_r(\epsilon) I$ 为偏应变张量， I 为二阶单位张量。因此，下面研究由偏应变所产生的单元变形能 U_d 。

设单元体的细观应变场是均匀的，且等于宏观应变场，则空间 n 方向上的杆件由偏应变所引起的伸长率

$$\lambda = \epsilon \cdot n \otimes n \quad (3)$$

记 n 方向上第 s 根杆件当伸长率为 λ 时的内力为 $f_{ss} = f_{ss}(\lambda)$ ，则 s 杆的变形能

$$U_{ss} = \int_0^1 f_{ss}(\lambda) d\lambda \quad (4)$$

n 方向上所有杆件的变形能之和

$$U_n = \sum_i U_{ni} = \sum_i \int_0^1 f_{ni}(\lambda) d\lambda \quad (5)$$

由于杆件伸长率 λ 仅与方向 n 相关, 上式求和与积分可以交换, 故

$$U_n = \int_0^1 F_n(\lambda) d\lambda \quad (6)$$

其中

$$F_n(\lambda) = \sum_i f_{ni}(\lambda) \quad (6)$$

是 n 方向上所有杆件内力之和。由于单元体可以取得单位体积, 故 $F(\lambda)$ 也是方向 n 上杆件的内力密度, 以下称之为内力一伸长率函数。

分析(6)式, 看到一个方向上的所有微杆件的变形能可以表示成该方向上的内力对伸长率的积分。因此, 图 1-1 所示的随机分布的微杆件系统可以处理成沿三维空间各方向呈均匀分布的一维组件的集合体, 如图 1-2。

单元体内所有杆件的变形能为各方向组件变形能之和。因此,

$$U_n(e) = \int_Q \left(\int_0^1 F_n(\lambda) d\lambda \right) d\Omega \quad (7)$$

Q 为单位球面, 其上的矢径为方向 n 。

上述推导过程中, 用到了细观结构的均匀应变假设。事实上, 这个假设可以适当放松。若细观应变 ϵ' 与宏观应变 e 满足

$$\epsilon' = a \mathbf{R}^T \cdot \epsilon \cdot \mathbf{R}$$

a 为常数, \mathbf{R} 为转动张量。则 n 方向上的杆件虽然不能划入该方向组件的能量之中求和, 但它在 $\mathbf{R}^T \cdot n$ 方向组件的能量求和中出现, 因为将上式代入(3)相当于(3)中 n 被 $\mathbf{R}^T \cdot n$ 替代以及乘以常数, 因此总变形能(7)仍然成立。

随着材料单元进入塑性变形, 方向组件的内力伸长率函数 $F_n(\lambda)$ 进入塑性阶段, (7) 中对 λ 的积分为沿变形路径的积分, 因此 $U_n(e)$ 并不是 e 的状态函数。

将(7)代入(2), 沿变形路径求导, 得到与应变功共轭的应力

$$\sigma = \frac{\partial U}{\partial \epsilon} = K_{tt}(e) \mathbf{I} + \int_Q F_n(\lambda) \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) d\Omega \quad (8)$$

这样的应力为单元体边界上各杆件的内力效应, 因而它与 Cauchy 应力概念一致。

应用时, 本构关系(8)采用增量形式:

$$\dot{\sigma} = \mathbf{E} : \dot{\epsilon} \quad (9)$$

刚度张量 \mathbf{E} 为(8)对应变 ϵ 的导数, 即

$$\mathbf{E} = K \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \int_Q F'_n(\lambda) \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) \otimes \left(\mathbf{n} \otimes \mathbf{n} - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) d\Omega \quad (10)$$

式中 $F'_n(\lambda)$ 为 $F_n(\lambda)$ 的导函数。数值计算中, 球面上的积分可以离散化。将球面等分 M 个, 其上的各量以平均值代替, 则(10)成为:

$$\mathbf{E} = K \mathbf{I} \otimes \mathbf{I} + \frac{2\pi}{M} \sum_{n=1}^M F'_n(\lambda_n) \left(\mathbf{n}_n \otimes \mathbf{n}_n - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) \otimes \left(\mathbf{n}_n \otimes \mathbf{n}_n - \frac{1}{3} \mathbf{I} \right) \quad (10)$$

本文曾试用 $M = 25, 73, 163$ 等进行计算，发现 $M = 73$ 已具有足够的精度。以下所举的数值例子都是 $M = 73$ 的结果。

将(10)中的积分离散成求和，相当于把三维空间中连续变化的方向以有限数目的方向代替，如图 1-3。但是，材料单元的模型并不是图 1-3 所示的辐条式结构，而是以每根辐条所代表的方向上呈均匀分布的微杆件集合体，即图 1-2。

三、内力—伸长率函数

在增量刚度张量(10)中，组件方向 n 为模型参数。因此，除体积弹性模量 k 外，内力—伸长率函数 $F_n(\lambda)$ 反映着材料的宏观变形力学性质。

然而，由于多晶金属细观结构极其复杂，人们对许多组份的变形力学性质还缺乏足够的了解，内力—伸长率函数目前还不能从定义式(6)来予以确定。克服这个困难的一条可行途径是根据某些简单变形状态下的理论或实验的宏观应力应变关系反演出内力—伸长率函数。不失一般性，下面给出利用经剪切变形宏观应力应变实验数据计算单调加载时各向同性内力—伸长率函数，即 $F(\lambda) = F_n(\lambda)$ 的方法。

对纯剪切应变（工程应变） γ ，以球坐标参数记方向数 $(n_x, n_y, n_z) = (\sin \phi \cos \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \phi)$ ，则本构关系(9)及(10)成为：

$$\dot{\tau} = \frac{2\pi}{M} \sum_{n=1}^M F'(\lambda_n) i_n \quad (11)$$

其中： τ 为剪应力，

$$\lambda_n = \sin^2 \phi_n \cos \theta_n \sin \theta_n \cdot \gamma \quad (12)$$

在线弹性阶段， $\tau = G\gamma$ ， G 为剪切模量。从(11)(12)看出， $F(\lambda)$ 也为线性函数。

记 $F(\lambda) = \alpha\lambda$ ，则(11)(12)给出 $\alpha = G / \left(\frac{2\pi}{M} \sum_{n=1}^M \sin^2 \phi_n \cos \theta_n \sin \theta_n \right)$ 。当 $M \rightarrow \infty$ 时， $\alpha \rightarrow \frac{15}{2\pi} G$ 。因此，在线弹性阶段一般有：

$$F(\lambda) = \frac{15}{2\pi} G\lambda \quad (13)$$

当材料达到屈服时， $\gamma = \gamma_0$ ， γ_0 为屈服剪切应变。此时， $F(\lambda)$ 也达到屈服，且屈服伸长率 λ_0 为所有方向上最大的伸长率。由(12)得：

$$\lambda_0 = \frac{1}{2} \gamma_0 \quad (14)$$

最大伸长率方向为 $\phi = 90^\circ$ 、 $\theta = \pm 45^\circ$ ，即宏观应变的主方向。

当材料进入塑性变形时，如果塑性变形足够小，则(11)中只有最大伸长率方向上的组件发生塑性变形，记之为 λ_k ，而其余组件仍处于弹性阶段。将(11)改写成：

$$\dot{\tau} = \frac{2\pi}{M} \sum_{n=1, n \neq k}^M F'(\lambda_n) i_n + \frac{2\pi}{M} F'(\lambda_k) i_k \quad (15)$$

则对应一定的 $\dot{\tau}$ 、 i 和 γ_0 ，可以由(12)(13)计算出 λ_n 、 i_n 和上式等号右边的第一部分，进而由上式解出 $F'(\lambda_k)$ 以及 $F(\lambda_k) = F(\lambda_0) + F'(\lambda_k)i_k$ 。

重复上述步骤, 每步中取变形增量足够小, 使(11)成为象(15)那样的关于一个未知内力梯度的方程, 则可以递推地由实验应力应变数据确定内力一伸长率函数。

对若干实验数据计算表明, 把单调加载时的内力一伸长率函数取成线性强化形式具有良好的精度, 即一般有

$$F(\lambda) = \begin{cases} \alpha\lambda & |\lambda| \leq \lambda_0 \\ \alpha\lambda_0 + \beta(\lambda - \lambda_0) & |\lambda| > \lambda_0 \end{cases} \quad (16)$$

其中: $\alpha = \frac{15}{2\pi} G$, λ_0 为屈服伸长率, β 为常数。同时, β 一般比 α 小得多, 这反映出内力一伸长率函数所描述的细观组分的变形力学性质近似符合于 Schmid 定理。

单调加载时的内力一伸长率函数确定后, 可以利用 Mroz 的随动强化模型^[14]或 Zienkiewicz 的 Sublayer 模型^[15]给出卸载和反向加载时的内力一伸长率函数。其具体表达式较长, 详见文^[14]或考虑二维本构模型的文^[13]。

四、数值例子

1. 各向同性线弹性本构关系

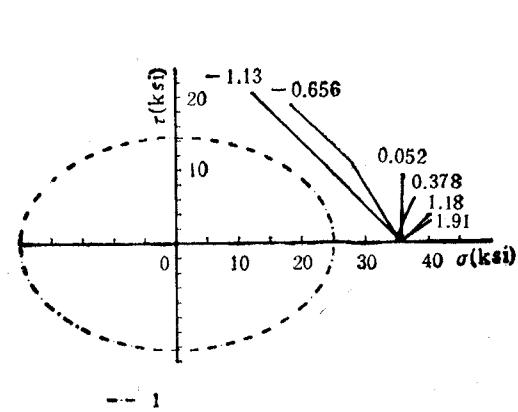
上节指出, 在线弹性阶段内力一伸长率函数为线性函数。将(13)代入(8), 经运算得到:

$$\sigma = \lambda \epsilon_r(\epsilon) I + 2G\epsilon$$

$\lambda = k - \frac{2}{3} G$ 为 Lame 常数。显然, 上式正是广义虎克定律。因此, 本文的弹塑性本构关系(8)包含了广义虎克定律。

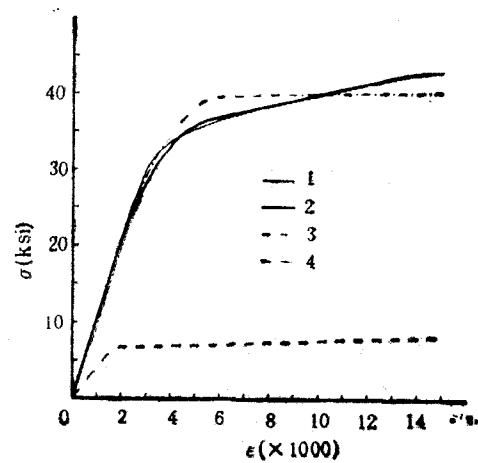
2. 薄壁圆筒拉扭复合弹塑性变形

Budiansky^[1] 等对 14S-T4 铝合金薄壁圆筒在多种复杂加载路径下的弹塑性变形做



—·—Mises 屈服面
——加载路径

图 2-1 加载路径

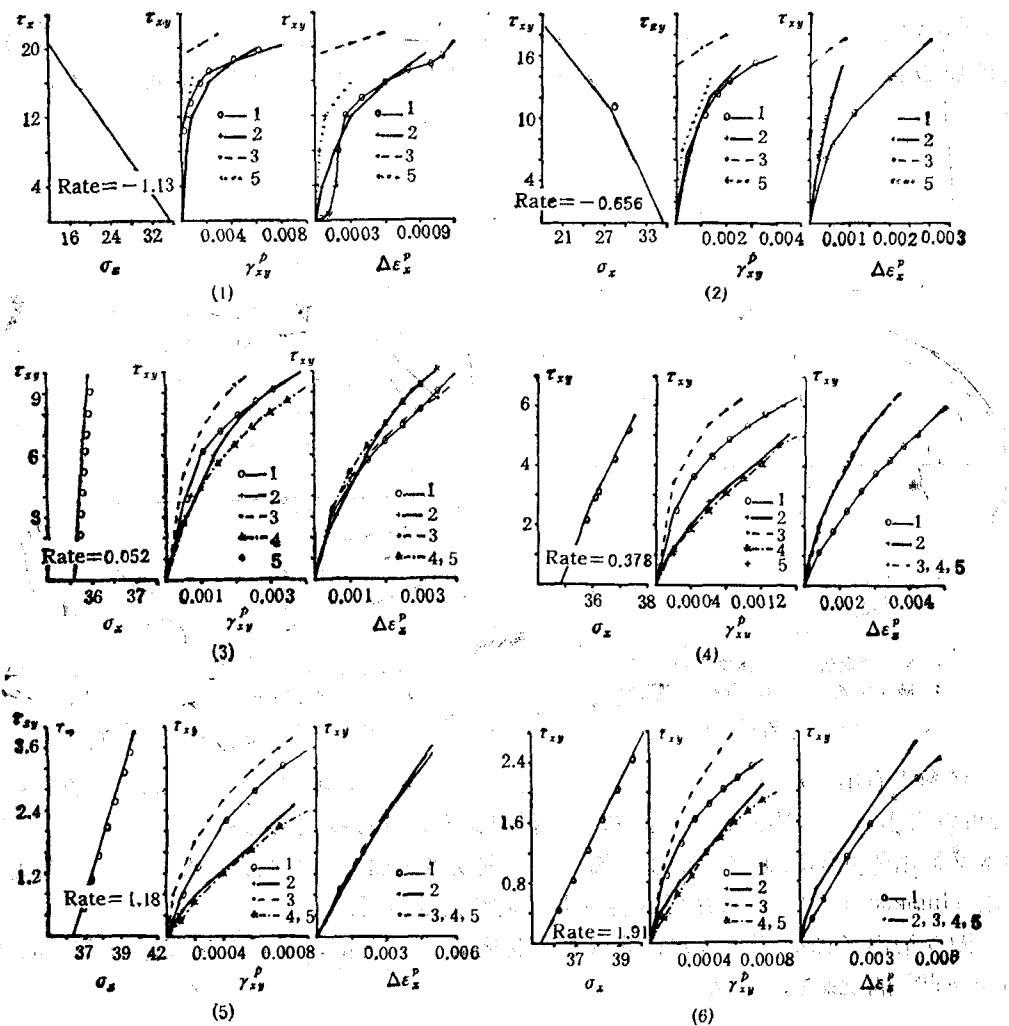


1. Budiansky 实验曲线
2. 本文线性强化组件模拟曲线
3. 本文理想弹塑性组件模拟曲线
4. 线性强化内力一伸长率函数

图 2-2 应力应变曲线的比较

了比较精细的试验，并与几个理论计算结果进行了对比。T. H. Lin 教授在研究物理塑性理论时曾多次引用了这组结果^[7-9]。本文沿 Budiansky 的加载路径如图 2-1，用本构关系(9)(10)计算了薄壁圆筒拉扭复合弹塑性变形。

首先，利用 Budiansky 的单向压缩应力应变实验数据确定单向加载时的内力一伸长率函数。计算结果如图 2-2。从图中看到，内力一伸长率函数由线性和略有线性强化的折线所组成。图中还给出了用理想弹塑性的内力一伸长率函数所模拟的宏观应力应变曲线，从中看出它虽然不如用线性强化的内力一伸长率函数所模拟的实验曲线，但两者的基本趋势和量级是一致的。



1 试验 2 本文 3 流动理论 4 形变理论 5 滑移理论

图 3 薄壁圆筒塑性变形的计算结果与比较

复杂加载路径是先在 $\sigma = 35 \text{ ksi}$ 压缩下进入塑性变形，然后在 $\sigma-\tau$ 空间中沿 $\tau/\sigma = 1.91, 1.18, 0.378, 0.052, -0.656, -1.13$ 六种路径加载。本文的计算结果及其

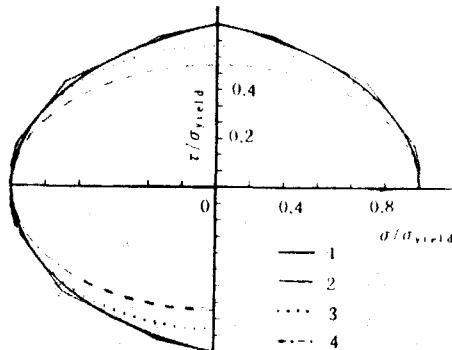
与 Budiansky 的试验数据和其它理论的计算曲线如图 3-1 至 3-6。

图 3-1 和图 3-2 是加载方向变化剧烈的两种加载方式。此时, 形变理论不能适用, 流动理论预见的塑性应变明显小于试验结果, 本文的结果比较接近于实验数据。对其余四种情况, 本文结果与实验数据基本一致, 与形变理论和滑移理论^[9]的结果接近。计算表明, 若在内力一伸长率函数中考虑强化作用如图 2-2, 则本文的计算结果将更趋于实验数据。

作者还注意到, 本文的计算结果与 T. H. Lin 教授在文^[9]中给出的结果非常接近。

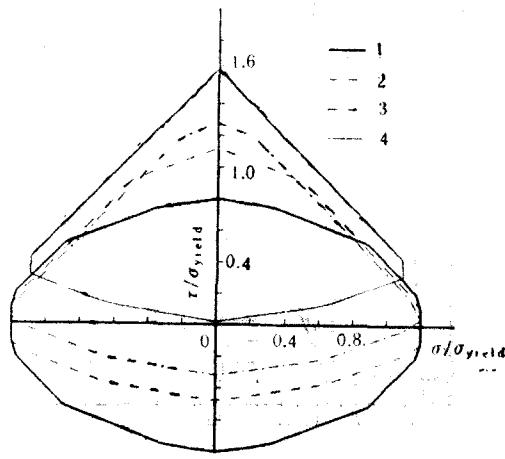
3. 对屈服面形状的预测

本文的弹塑性本构关系仅取决于内力一伸长率函数, 而不必涉及屈服面的概念。反之, 当确定了屈服点的定义以后, 容易通过模拟不同加载方向的应力应变反应, 计算出相应的屈服面。图 4、图 5 是以比例极限为屈服准则的初始屈服面和后继屈服面的计算结果。



1. 本文理论结果 2. 本文数值结果
3. Mises 准则 4. Tresca 准则

图 4 初始屈服面



1. 初始屈服面 2. 第一后继屈服面
3. 第二后继屈服面 4. 第三后继屈服面

图 5 初始屈服面与后继屈服面

从图 4 看出, $M = 73$ 时计算的初始屈服面比 Mises 屈服面略大一点。实质上, 由(3)可以看出, 最大的伸长率达到初始屈服伸长率对应着最大的偏应变达到某一临界值, 即本文给出的初始屈服准则是最大偏应变准则或最大偏应力准则, 如图 4。这个准则早已由 Шлиничский^[16] 提出, 并与双剪应力准则^[17]完全相同。

图 5 给出了预剪切变形的后继屈服面变化情况。可见, 这种变化规律与 Naghdi^[18] 和 Rees^[19] 的试验结果相吻合。

五、结 论

1. 三维组集模型是由分析材料细观结构的变形与能量机制而形成的, 利用了物理塑性理论的研究成果, 具有较可靠的物理基础。同时, 它还可以进一步考虑潜在强化等细观机制对材料宏观性能的影响, 具备进一步发展的潜力。

2. 本模型的特点在于不过多深究那些对材料宏观应力应变关系影响不大的具体的细观和微观结构及其相互作用，仅用三维空间方向上分布的一维组件来描述材料的三维宏观本构性质。一维组件的力学性质由传统材料试验予以确定。这样所得到的弹塑性本构关系不含后继屈服面概念，适宜于各种复杂加载情况。同时，显示的增量本构关系便于它在数值计算中的应用。

3. 本文讨论了金属材料在小变形下率无关的弹塑性本构关系。这种化三维问题为多个一维问题的方法，可望应用于研究其它本构关系之中。

致谢 本文的前期研究工作是第一作者在挪威 DNV 研究中心完成的，后期工作得到了中国科学院力学研究所非线性连续介质力学开放研究实验室的大力支持，在此作者表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] Budiansky, B., Dow, N. F., Peters, R. W. and Shepherd, R. P., Proc. Ist. U. S. Nat. Congr. Appl. Mech., (1951), 503.
- [2] Taylor, G. I., J. Inst. Metals 62(1938), 307.
- [3] Lin, T. H., J. Mech. Phys. Solids, 5(1957), 143.
- [4] Kroner, E., Acta Metall., 9, (1961), 155.
- [5] Budiansky, B. and Wu, T. Y., Proc. 4th U. S. Nat. Congr. Appl. Mech. (1962), 1175.
- [6] Lin, T. H., J. Appl. Mech. 11, 1971, 255.
- [7] Lin, T. H., Ito, Y. M., and Yu, C. L. J. Appl. Mech. 41, (1974), 587.
- [8] Lin, T. H. and Ribeiro S. G., J. Solids. Struc., 17, (1981), 545.
- [9] Lin, T. H., ASME J. Engng. Mat. and Tech., 106(1984), 290.
- [10] Hutchinson, J. W., Proc. Roy. Soc. Lond., A319(1970), 247.
- [11] Asaro, R. J., ASME J. Appl. Mech. 23(1983), 1.
- [12] Drucker, D. C., ASME J. Engng. Mat. and Tech., 106, (1984), 286.
- [13] Liang, N. and Bergan, P. B., 'A multi-dimension composite model of elasto-plastic continua under non-proportional loading condition'. to be published in Acta Sinica.
- [14] Mroz, Z., Acta Mech. 7, (1969), 199.
- [15] Owen, D. R. J., Prakash, A. and Zienkiewicz, O. C., Compt. and Struc., 4, (1974), 1251.
- [16] Ильинский, А. Ю., Механика, 46(1940).
- [17] 俞茂鍇, 双剪应力强度理论研究, 西安交通大学出版社(1988)。
- [18] Naghdi, P. M., Essenburg, F. and Koff, W., J. Appl. Mech., 25, 2(1958), 201.
- [19] Rees, D. W. A., J. Strain Analysis, 16, 2(1981), 85.

A 3-D COMPOSITE CONSTITUTIVE MODEL OF ELASTO-PLASTICITY FOR POLYCRYSTALLINE MATERIALS

N. G. Liang

Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences

P. S. Cheng

Laboratory for Nonlinear Mechanics of Continuous Media Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences

Abstract This paper is aimed at developing an elasto-plastic constitutive model for polycrystalline materials. The model is an energy-equivalent system composed of extensive compressive components well-oriented and distributed uniformly in the 3-D space to simulate how the microstructures of materials store and dissipate energy during deformation and slippage. The components are extended/compressed compatibly with the overall strain and each of them undergoes its own elongation history dependent on its orientation. The overall stress defined as the work conjugate tensor with respect to the incremental strain tensor is just balanced by the resultant of loads exerted on the components so that the load-elongation relation of the components can be determined from conventional material experiments.

By taking such a system as a material element, an explicit constitutive equation has been derived and used to predict stress-strain responses of materials under complex loading processes. Comparison is made with experiments^[1-3] and previous plasticity theories.

Key words dilatation energy, distortion energy, plasticity, 3-D composite model, constitutive equation.