

多晶体变形、应力的不均匀性及宏观响应¹⁾

张克实

(西北工业大学工程力学系, 西安 710072; 广西大学土木建筑学院, 南宁 530004)

摘要 从单晶滑移变形分析的角度探讨多晶体塑性变形和应力的不均匀性及宏观力学响应: 建议了一种当前构形下以应力为基本变量的单晶黏塑性增量迭代计算方法; 用 Voronoi 晶粒集合体模型研究多晶体由于晶粒几何及取向的随机性造成的变形和应力的不均匀性, 进行了多晶集合体的宏观响应和晶粒位向演化数值分析. 结果表明: (1) 多晶体内等效塑性应变和应力分量在统计上呈现高斯分布, 在应变硬化过程中, 随着塑性变形增加多晶体微观应力的统计变异系数会越来越大; (2) 用 Voronoi 模型计算可得到沿最大剪应力方向的滑移变形带; (3) 多晶体内最高三轴拉应力一般出现在晶界特别是三晶交界处; (4) Voronoi 模型能用于织构分析.

关键词 各向异性, 晶体黏塑性, Voronoi 多晶体, 随机取向, 应力不均匀性

引 言

多晶体材料由单晶晶粒组成, 晶粒成分、相结构、尺寸、取向及各向异性是多晶材料构成的主要因素, 这些因素都具有随机性. 因此, 一般意义上的多晶材料的力学行为实际是指包含一定数目晶粒集合体平均意义上的力学行为, 是该集合体内各单晶晶粒力学行为合成的结果. 但在力学分析中, 多晶材料的力学行为一般都被处理为连续均匀材料的力学行为.

原则上, 多晶体在平均意义上的力学性质可以由单晶体力学性质计算得到. Taylor^[1] 曾提出利用单晶体力学性质推算多晶体单轴拉伸力学性质的模型和方法. 他在模型中假设: 单晶体内的塑性变形是均匀的且与多晶体宏观塑性变形相同; 单晶体各滑移系的临界分解剪应力相同且服从相同的各向同性硬化规律. 于是对于初始无取向占优的多晶体材料可以利用最小变形功率法则求得多晶体应力应变曲线. Budiansky 和 Wu^[2], Hill^[3] 和 Hutchinson^[4] 也都探讨过由单晶体力学性质推算多晶体力学性质的研究工作^[5]. 不仅是应力应变曲线, 多晶体材料的后继屈服面演化和塑性变形诱导的塑性流动各向异性等也都与多晶材料中单晶晶粒的力学性质及取向演化有关^[4]. 上述这些研究主要关心多晶材料的“平均化”过程, 对材料内部的变形和应力差异并不在意.

由于晶粒的随机取向, 多晶体宏观上看来均匀的变形在细观上是不均匀的. 实验观测测定多晶体的应变分布证实了这一点. 但为了避免分析上的困难, 在对材料进行力学分析时人们往往采用均匀(各向同性)和连续的假设. 在此基础上关于材料“点”的应力和应变定义实际上抹去了细观尺度上材料微元内的不均匀性, 忽略了多晶材料细观尺度上的微结构、各向异性性质和局部细观不均匀应力的影响. 产生这种不均匀性的原因主要来自材料的微观结构和材料组成方式, 它们的差异对结构的宏观响应也许微不足道, 但对材料的微观过程如材料的损伤、断裂和破坏则可能是至关重要的. 因为材料的破坏发端于材料局部微小区域的微结构, 材料的微观应力及其分布方式对这样微小尺度区域内发生的事件的影响是不能被忽略的. Barbe 等^[6] 利用 Voronoi 模型研究了多晶体内的应力状态, 计算结果表明由于晶粒的相互约束可以导致多晶体内晶粒间非常大的应力差异. 但这项研究中多晶体涉及的塑性变形很小.

多晶塑性分析的基础是单晶塑性理论和计算方法, 单晶塑性有限变形的几何学、运动学及本构理论框架是由 Hill 等^[7] 和 Asaro 等^[8] 学者建立起来的. Peirce 等^[9] 建立了当前构形下单晶塑性有限变形率形式本构计算的改进显式方法. 而 Kalidindi 等^[10], Maniatty 等^[11], Sarma 和 Zacharia^[12] 在对多晶材料织构演化的研究中发展了在卸载构形下的

2003-11-13 收到第 1 稿, 2004-07-09 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金(19972055, 10472092)和航空科学基金(04C53027)资助项目.

多晶塑性有限变形计算方法.

本文主要探讨多晶体内的不均匀力学过程,力图用细观尺度上晶体滑移和应力的分析来研究多晶体内部由于取向和晶粒几何的随机性造成的不均匀状态(暂不讨论材料的相及相结构的影响). 内容涉及:

- (1) 随机生成的 Voronoi 多晶集合体模型(模型中晶粒是随机生成的多面体且具有随机的取向,假定各晶粒在相同位向上的弹性和滑移特性相同);
- (2) 在当前构形下以 Cauchy 应力张量为基本变量的单晶黏塑性本构关系迭代计算方法;
- (3) 多晶集合体内非均匀塑性变形的晶体黏塑性分析;
- (4) 不同宏观应力状态下多晶体内的应力分布及统计特征;
- (5) 多晶集合体的宏观响应与晶粒取向的演化.

1 细观尺度下的多晶材料模型

1.1 Voronoi 多晶集合体

为了考虑多晶体内部晶粒尺寸、形状和取向的随机性,本文采用 Voronoi 多晶集合体作材料的代表性单元(视为宏观的材料“点”). 在该集合体内,晶粒尺寸、形状和取向均作无占优趋向的随机安排,对每个单晶晶粒而言材料的弹性和非弹性性质是各向异性的. 由于代表性单元包含相当多的晶粒,其整体响应或多晶集合体的宏观性质近似于各向同性.

Voronoi 多晶集合体模型的计算规模较大,而且非弹性计算比较耗时. 出于节省机时的考虑,本文采用的代表性单元有两种: (1) 平面二维模型,包含 444 个晶粒, 44 104 个 4 节点单元 472 个 3 节点单元, 53 100 个节点; (2) 三维立方体模型,包含 200 个单晶晶粒, 50 144 个四面体单元, 9 865 个节点. 作为初步分析,模型中每个晶粒的单晶各向异性力学性质是相同的,不考虑晶粒中的微孔洞和微裂纹. 用 Voronoi 方法生成的多晶集合体如图 1 所示. 代表性单元采用宏观均匀变形的假设,在此假设下代表性单元边界表面的变形符合周期条件,保

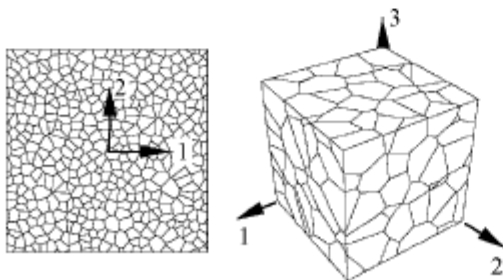


图 1 2 维与 3 维 Voronoi 多晶集合体模型
Fig.1 Models of Voronoi polycrystal tessellation for 2D and 3D

证了物体的宏观连续性.

1.2 单晶晶粒的各向异性力学行为

单晶晶粒的弹性和非弹性性质一般都是各向异性的. 对满足小弹性应变假设的金属材料而言,扣除塑性后单晶体的弹性本构关系在晶轴坐标系下参照当前构形可以描述为

$$\sigma^{crys} = C^{(4)crys} : \epsilon^{crys}$$

或

$$\Delta \sigma^{crys} = C^{(4)crys} : \Delta \epsilon^{crys} \quad (1)$$

σ^{crys} , $C^{(4)crys}$ 和 ϵ^{crys} 分别是 Cauchy 应力、四阶各向异性弹性本构张量和对数弹性应变, $\Delta \sigma^{crys}$ 和 $\Delta \epsilon^{crys}$ 是相应的增量. 式 (1) 中全量和增量表述可以对应于不同的求解方法.

单晶体各滑移系分解剪应变的演化可用 Hutchinson^[13] 建议的黏塑性关系来描述

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

$\dot{\gamma}_0$ 称为参考剪应变率,是待定材料常数; k 是反映材料的率敏感性质的材料常数; $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 和 $\tau^{(\alpha)}$ 分别是单晶体第 α 滑移系的分解剪应变率和分解剪应力; 而 $g^{(\alpha)}$ 是第 α 滑移系的非弹性滑移硬化函数,其演化规律为

$$\left. \begin{aligned} \dot{g}^{(\alpha)}(\gamma) &= \sum_{\beta}^n h_{\alpha\beta}(\gamma) |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \\ \gamma &= \int \sum_{\beta}^n |d\gamma^{(\beta)}| \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

式中 $h_{\alpha\beta}$ 是滑移硬化模量, Hutchinson^[13] 建议用下式来描述滑移系的潜硬化

$$h_{\alpha\beta}(\gamma) = h(\gamma)[q + (1 - q)\delta_{\alpha\beta}] \quad (4)$$

这里 q 是常数,一般取 $1 \leq q \leq 1.4$, 且^[8]

$$h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \quad (5)$$

h_0 是初始硬化率, τ_0 是初始临界分解剪应力且 $g^{(\alpha)}(0) = \tau_0$, τ_s 是临界分解剪应力的饱和值,参数 γ 按下式计算

$$\gamma = \int \sum_{\beta=1}^n |d\gamma^{(\beta)}| \quad (6)$$

本文以 Asaro 和 Needleman^[14] 研究的铜多晶材料为研究对象, 其单晶晶粒的材料弹性常数 (立方对称) 为: $C_{11} = 51.227 \text{ GPa}$, $C_{12} = 36.93 \text{ GPa}$, $C_{44} = 22.937 \text{ GPa}$. 单晶的黏塑性滑移模型参数为: $\tau_0 = 60.84 \text{ MPa}$, $\tau_s = 109.51 \text{ MPa}$, $h_0 = 541.5 \text{ MPa}$, $\dot{\gamma}_0 = 1 \times 10^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, $q = 1$ 和 $k = 200$ (意味着材料响应近似于率无关). 铜单晶具有 FCC 八面体滑移系 (见表 1).

表 1 FCC 八面体滑移系的滑移面法向矢量与滑移方向矢量

Table 1 Slip plane normal vector \mathbf{n} and slip direction vector \mathbf{m} for FCC octahedral slip systems

	1	2	3	4	5	6
\mathbf{n}	(111)	(111)	(111)	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}$ 11)
\mathbf{m}	[10 $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ 10]	[0 $\bar{1}$ 1]	[01 $\bar{1}$]	[$\bar{1}$ $\bar{1}$ 0]	[101]
	7	8	9	10	11	12
\mathbf{n}	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}$ 11)	($\bar{1}$ 11)	(1 $\bar{1}$ 1)	(1 $\bar{1}$ 1)	(1 $\bar{1}$ 1)
\mathbf{m}	[$\bar{1}$ 0 $\bar{1}$]	[1 $\bar{1}$ 0]	[011]	[0 $\bar{1}$ 1]	[110]	[$\bar{1}$ 01]

2 单晶体滑移黏塑性的计算方法

考虑有限变形情形, 物质点在加载的增量过程中都伴随有增量刚体旋转. 一般地, 要满足应力描述的客观性, 应力的累积可以按照下式进行^[15]

$${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma} = \Delta \mathbf{R} \cdot {}^t\boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \mathbf{R}^T + \Delta \boldsymbol{\sigma} \quad (7)$$

式中 $\boldsymbol{\sigma}$ 是 Cauchy 应力, 对应当前构形它与对数应变是功共轭的. 上式中, 右端第一项表示增量过程物质点的应力从 t 时刻到 $t + \Delta t$ 时刻增量过程因物质发生增量刚体旋转 $\Delta \mathbf{R}$ 导致的应力变化, 而第二项表示该增量过程物质点扣除旋转影响后由材料本构关系确定的增量应力 $\Delta \boldsymbol{\sigma}$.

在多晶集合体中单晶晶粒的位向一般是随机的, 晶粒内物质点的晶轴坐标系标架相对于整体固定坐标系标架相差一个刚体旋转. 在当前时刻该旋转 ${}^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{\text{crys}}$ 与 t 时刻及初始时刻对应的旋转 ${}^t\mathbf{T}^{\text{crys}}$ 和 ${}^0\mathbf{T}^{\text{crys}}$ 可有以下关系

$${}^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{\text{crys}} = \Delta \mathbf{R}^e \cdot {}^t\mathbf{T}^{\text{crys}} = {}^{t+\Delta t}\mathbf{R}^e \cdot {}^0\mathbf{T}^{\text{crys}} \quad (8)$$

式中 $\Delta \mathbf{R}^e$ 是 t 时刻到 $t + \Delta t$ 时刻的晶格增量旋转, ${}^{t+\Delta t}\mathbf{R}^e$ 是其累积. ${}^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{\text{crys}}$ 可用于张量的坐标变换, 为简便起见后面将 ${}^{t+\Delta t}\mathbf{T}^{\text{crys}}$ 简记为 \mathbf{T}^{crys} . 于是固定整体坐标系下对应于当前构形的 Cauchy 应力增量可以通过对式 (1) 进行坐标变换求得

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \overset{(4)}{C}_G : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^e \quad (9)$$

式中 $\overset{(4)}{C}_G$ 是整体坐标系下的四阶弹性本构张量, 可由晶轴坐标系下四阶弹性本构张量根据晶格的刚体旋转通过旋转变换得到; $\Delta \boldsymbol{\epsilon}^e$ 是整体坐标系下弹性对数应变增量. 于是

$${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{\sigma} = \Delta \mathbf{R} \cdot {}^t\boldsymbol{\sigma} \cdot \Delta \mathbf{R}^T + \overset{(4)}{C}_G : \Delta \boldsymbol{\epsilon}^e \quad (10)$$

利用速度梯度张量的和分解, 可以将应变增量张量作和分解

$$\Delta \boldsymbol{\epsilon} = \Delta \boldsymbol{\epsilon}^e + \Delta \boldsymbol{\epsilon}^p \quad (11)$$

式中 $\Delta \boldsymbol{\epsilon}^p$ 是增量塑性应变, 而对数应变增量由下式定义 (可由变形率张量积分导出)^[15]

$$\Delta \boldsymbol{\epsilon} = \sum_{i=1}^3 \ln(\Delta \lambda_i) \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \quad (12)$$

这里 λ_i 是主伸长 (伸长率主值), $\lambda_i > 0$, 且对无应变状态 $\lambda_i = 1$; $\Delta \lambda_i$ 是增量变形的主伸长, 一样有 $\Delta \lambda_i > 0$, 增量应变为零时 $\Delta \lambda_i = 1$; \mathbf{n}_i 是 $t + \Delta t$ 时刻当前主伸长 λ_i 的方向矢量. 当已知 t 和 $t + \Delta t$ 时刻的变形梯度 \mathbf{F} 时, $\Delta \lambda_i$ 和 \mathbf{n}_i 便可以求得^[15]. 于是式 (9) 可写为

$$\Delta \boldsymbol{\sigma} = \overset{(4)}{C}_G : (\Delta \boldsymbol{\epsilon} - \Delta \boldsymbol{\epsilon}^p) \quad (13)$$

利用塑性变形梯度的演化关系

$$\dot{\mathbf{F}}^p = \left[\sum_{\alpha=1}^n (\mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{n}^{(\alpha)}) \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right] \cdot \mathbf{F}^p \quad (14)$$

可以给出增量塑性应变的计算公式

$$\Delta \boldsymbol{\epsilon}^p = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^{(\alpha)*} \Delta \gamma^{(\alpha)} \quad (15)$$

式中

$$\mathbf{P}^{(\alpha)*} = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^{(\alpha)*} \otimes \mathbf{n}^{(\alpha)*} + \mathbf{n}^{(\alpha)*} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)*}) \quad (16)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)*} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{m}^{(\alpha)}, \quad \mathbf{n}^{(\alpha)*} = \mathbf{n}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{e^{-1}} \quad (17)$$

$\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 和 $\mathbf{n}^{(\alpha)}$ 分别表示初始的第 α 滑移系滑移方向的单位向量和滑移面的单位法向量, 更新为 $\mathbf{m}^{(\alpha)*}$ 和 $\mathbf{n}^{(\alpha)*}$ 是为了考虑晶格的旋转和畸变对滑移的影响. 而 \mathbf{F}^e 是变形梯度的弹性部分. 根据变形梯度乘法分解的基本公式, \mathbf{F}^e 的增量可以利用下式计算

$$\Delta F^e = (\Delta F \cdot F^{-1} - F^e \cdot \Delta F^p \cdot F^{p-1} \cdot F^{e-1}) \cdot F^e \quad (18)$$

求得 ΔF^e 便可以确定单晶材料物质点的晶格变形 V^e 和晶格刚体旋转 R^e , 进而可以确定晶轴坐标系的位向变化和计算各向异性四阶弹性张量 $\overset{\langle 4 \rangle}{C}$ 的旋转变换。

利用线性叠加计算当前增量步分解剪应变增量^[9]

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = [(1 - \eta)^{t \dot{\gamma}^{(\alpha)}} + \eta^{t+\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}}] \Delta t \quad (19)$$

式中 $0 < \eta \leq 1$ 是常量; $t \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 和 $t+\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 分别是滑移系 α 分解剪应变率的已知增量初始值和待求的增量末了值。

以上公式中, $t+\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}$, $t+\Delta t \sigma$ 和 Δe^p 是未知的, 但它们不是独立的. 由于未知量多且涉及复杂的耦合关系, 方程难以直接求解, 早先的数值分析是显式或改进显式方法来求解的^[9]. 显式求解是通过积分直接计算上述未知变量, 比较容易处理, 但收敛性要靠非常小的步长来保证. 隐式方法一般收敛性较好, 但构造求解格式过程往往比较复杂. 采用隐式方法时, 一般要从未知量中选一组基本未知量, 利用已知关系解耦以构造基本方程. 例如 Kalidindi 等实际是以定义在卸载构形上的 Second Piola-Kirchhoff 应力为基本未知量^[10]. Maniatty 等采用塑性变形梯度 F^p ^[11], 而 Sarma 和 Zachari 建议用弹性变形梯度 F^e 为基本未知量^[12]. 基本未知量的选择与采用的描述方式有关, 同时也影响求解的方法和计算效率。

本文计算是在当前构形下建立求解格式, 考虑到晶体黏塑性模型应变率是应力的函数这一特点, 作者采用以固定坐标系下的 Cauchy 应力作基本未知量. 这种格式的特点是无论滑移系有多少, 基本方程组的系数矩阵都是六阶的 (三维问题), 比选弹性变形梯度 F^e 和塑性变形梯度 F^p 为基本未知量的求解方程阶数低. 用此方法建立的单晶本构关系求解方程形式上比较简洁. 将式 (19) 代入式 (15), 则有

$$\sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} \Delta \gamma^{(\alpha)} = (1 - \eta) \Delta t \left(\sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} t \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) + \eta \Delta t \left(\sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} t+\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \quad (20)$$

注意到 Cauchy 应力与滑移系分解剪应力的关系

$\tau^{(\alpha)} = P^{(\alpha)*} : \sigma$, 有

$$\sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} t+\Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn}(t+\Delta t \tau^{(\alpha)}) \left(\frac{P^{(\alpha)*} : t+\Delta t \sigma}{t+\Delta t g^{(\alpha)}} \right)^k \quad (21)$$

因而可以得到关于 $t+\Delta t \sigma$ 的非线性方程组

$$t+\Delta t \sigma = r - H(t+\Delta t \sigma) \quad (22)$$

式中

$$r = \Delta R \cdot t \sigma \cdot \Delta R^T + \left\{ \overset{\langle 4 \rangle}{C}_G : \left(\Delta \varepsilon - (1 - \eta) \Delta t \sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} t \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right) \right\} \quad (23)$$

$$H(t+\Delta t \sigma) = \eta \Delta t \dot{\gamma}_0 \left(\overset{\langle 4 \rangle}{C}_G : H_1(t+\Delta t \sigma) \right) \quad (24)$$

$$H_1(t+\Delta t \sigma) = \left[\sum_{\alpha=1}^n P^{(\alpha)*} \operatorname{sgn}(t+\Delta t \tau^{(\alpha)}) \left(\frac{P^{(\alpha)*} : t+\Delta t \sigma}{t+\Delta t g^{(\alpha)}} \right)^k \right] \quad (25)$$

式 (22)~(25) 中未知量有 $t+\Delta t$ 时刻的 $t+\Delta t \sigma$, $P^{(\alpha)*}$ 和 $t+\Delta t g^{(\alpha)}$. 本文对式 (22)~式 (25) 的求解采用迭代结合校正的方法来进行: (1) 取 t 时刻的 $P^{(\alpha)*}$ 和 $g^{(\alpha)}$ 代入式 (22)~式 (25) 可以采用 Newton-Raphson 迭代求得 $t+\Delta t \sigma$ 的预报值 (为节省篇幅而略去具体过程); (2) 计算滑移系分解剪应变增量 $\Delta \gamma^{(\alpha)}$, 弹性变形梯度增量 ΔF^e 和累积弹性变形梯度; (3) 计算 $t+\Delta t$ 时刻的 $P^{(\alpha)*}$ 和 $t+\Delta t g^{(\alpha)}$, 并求 $t+\Delta t \sigma$ 的校正值. 该方法迭代求解 $t+\Delta t \sigma$ 预报值时先固定 $P^{(\alpha)*}$ 和 $g^{(\alpha)}$, 是一种隐式 - 显式相结合的方法。

为了更新有限元单元的切线刚度矩阵, 本文参照张克实^[16] 建议的 Jacobian 矩阵计算方法给出整体固定坐标系下计算 Jacobian 矩阵 C_G^{ep} 的公式

$$C_G^{ep} = C_G \left\{ I - \eta \hat{P}^* [I + \eta (A_\tau M_\tau - A_g M_h M_{\operatorname{sgn}})]^{-1} A_\tau \hat{P}^{*T} C_G \right\} \quad (26)$$

$$\left. \begin{aligned} M_\tau &\equiv [\hat{P}^{(i)*T} C_G \hat{P}^{(j)*}]_{n \times n}, \quad M_h = [h_{\alpha\beta}] \\ M_{\operatorname{sgn}} &= [\operatorname{sgn}(\tau^{(\beta)}) \delta_{\alpha\beta}] \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

A_τ 和 A_g 是对角矩阵, 两者的非对角元素均为零, 且对角元素分别是

$$\left. \begin{aligned} A_{\tau ii} &= \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(i)}}{\partial \tau^{(i)}} \quad (\text{不对 } i \text{ 求和}) \\ A_{gii} &= \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(i)}}{\partial g^{(i)}} \quad (\text{不对 } i \text{ 求和}) \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

$$\hat{P}^* \equiv (\hat{P}^{(1)*}, \hat{P}^{(2)*}, \dots, \hat{P}^{(n)*}) \quad (29)$$

而 $\hat{P}^{(\alpha)*}$ 和 C_G 分别是二阶张量 $P^{(\alpha)*}$ 和四阶张量 C_G 的向量、矩阵形式。

这里略加说明: 以上方法的特点是采用率本构关系的增量描述和以 Cauchy 应力为基本变量, 并且是在当前构形下用 Newton-Raphson 迭代格式求解. 本文作者按以上方法编制了与 ABAQUS 软件联合使用的用户材料子程序 [15].

3 多晶体细观与宏观应力应变分析

3.1 多晶体的平均应力和平均应变

对于多晶体代表性单元来说, 单元内单晶晶粒内部的应力和应变是微观的应力和应变. 从宏观角度来观测, 材料“点”的应力和应变实际是多晶体代表性单元的表现应力和应变. 多晶体代表性单元的表现应力 Σ 和应变 E 常用下式定义

$$\Sigma_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV, \quad E_{ij} = \frac{1}{V} \int_V \varepsilon_{ij} dV \quad (30)$$

上式表示多晶体代表性单元的表现应力和应变是该代表性单元所有晶粒内微观应力和应变按体积分的平均值. 需要指出, 平均意义上的多晶体代表性单元表现应力和应变不反映材料内部的不均匀性和材料微元内部应力应变的分布特性.

3.2 多晶体的弹性常数计算

多晶体中单晶晶粒为随机取向, 只要晶粒数目足够多, 多晶体的弹性性质必然是各向同性的. 因此, 如果知道单相多晶材料的单晶弹性性质, 就可以利用包含足够多单晶晶粒的 Voronoi 模型计算多晶宏观弹性性质. 另一方面, 对单相多晶体材料, 也可用经典的近似平均公式来计算多晶弹性常数. 为了考查 Voronoi 多晶集合体模型的合理性, 以下给出用多晶集合体模型计算和按 Voigt 近似平均公式 [17] 计算的多晶体弹性常数的比较:

Voronoi 多晶模型 (200 晶粒) 有限元计算结果: $E = 43\,885\text{MPa}$, $\nu = 0.3247$.

Voigt 近似平均公式计算结果: $\bar{E} = 44\,016\text{MPa}$, $\bar{\nu} = 0.3241$.

可知由 Voronoi 多晶集合体模型计算的 E, ν 误差在合理的范围内. 需要指出, Voronoi 多晶集合体模型可以考虑材料内部结构及其随机性, 还可以从统计角度考虑晶粒尺寸、位向有偏向的情形. 计算结果一般与模型包含晶粒数目有关, 晶粒数越多结果越接近某一确定数值.

3.3 多晶体内变形与应力的分布

由于单晶晶粒的各向异性与随机取向, 多晶体内部弹性变形、塑性变形及应力都是不均匀的. 本文用统计变异系数 (标准差与均值之比 σ/μ) 来描述多晶体内分布变量的不均匀性, 变异系数越大意味被统计量的不均匀性越强. 利用 Voronoi 多晶集合体模型, 对宏观单轴拉伸情形下多晶材料内非弹性变形的分布、及随变形增加的变化进行了初步分析 (由于晶粒的尺度太小难以测量, 这方面的试验研究实际上很难开展). 这里先讨论最简单的宏观单轴拉伸状态下多晶体内材料变形和应力的分布. 设多晶体受宏观单轴拉伸作用: 纵向拉伸的宏观正应力是 $\Sigma_{33} = \Sigma$, 宏观表面剪应力 $\Sigma_{ij} = 0, i \neq j$, 宏观横向正应力 $\Sigma_{11} = \Sigma_{22} = 0$.

在弹性阶段, 多晶体内部变形的不均匀性取决于晶粒的各向异性性质差异程度和初始取向分布. 由于弹性性质不变且弹性阶段晶粒取向相对变化极小, 多晶体内部变形不均匀性基本不变. 而进入塑性阶段后, 由于硬化不均匀和晶格旋转滑移系位向改变, 多晶体内塑性应变分布随材料变形增加是变化的. 图 2 给出了塑性应变和进入塑性后纵向应力

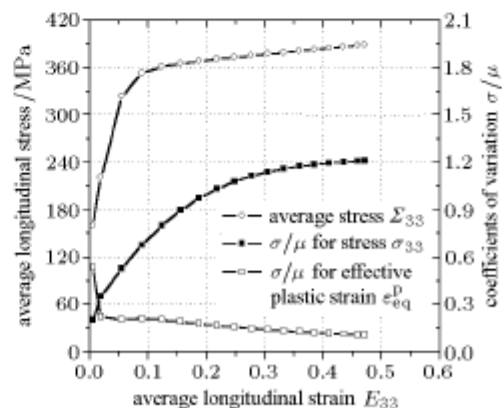


图 2 σ_{33} 和 ε_{eq}^p 的统计变异系数随平均纵向应变变化的曲线, 及平均纵向应力应变曲线
Fig.2 Coefficients of variation of the distribution of σ_{33} and ε_{eq}^p vs. average longitudinal strain; the average longitudinal stress-strain relation

的统计变异系数随变形增加的变化曲线，以及纵向应力应变的均值曲线。曲线表明，刚进入塑性时塑性变形分布差异最大（因为大部分晶粒仍然处于弹性状态），这种差异是随变形增加而下降的。而进入塑性后纵向应力的不均匀性随变形增加而增加，原因是外载荷作用下晶体滑移变形模式使得容易滑移的晶粒或区域硬化率下降、变形趋势加剧、应力相对降低，而变形协调的要求使得难滑移的晶粒或区域承受更大的载荷。图中也可以看到，不均匀性随塑性变形增加的趋势越来越弱，因此不排除进一步的变形后这种不均匀下降的可能。

图 3 给出多晶体内塑性应变 ϵ_{eq}^p ($\epsilon_{eq}^p = \sqrt{\frac{2}{3}\epsilon_{ij}^p\epsilon_{ij}^p}$) 在变异系数接近 0.1 时按体积分数的统计分布，从图可知多晶体内塑性应变的分布符合高斯分布的特点。尽管处于宏观均匀状态，其最大和最小值仍可相差一倍以上。塑性应变的分布不均匀程度表明，多晶分析常用的 Taylor 模型的单晶体内塑性变形均匀且与多晶体宏观塑性变形相同的假设不尽合理。

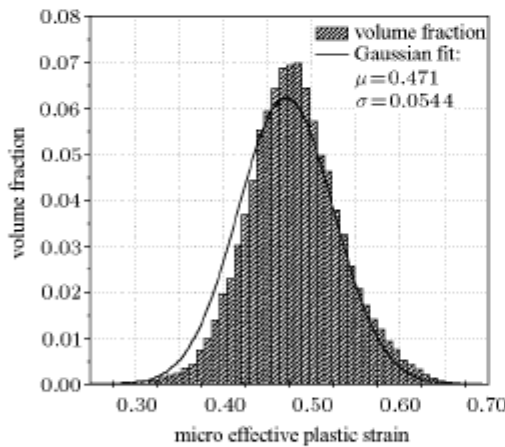


图 3 Voronoi 多晶体内塑性应变分布

Fig.3 Statistical distribution of micro effective plastic strain in a Voronoi tessellation

图 4 显示了宏观拉伸应变等于 0.471 时的纵向应力分布，从图中可见尽管处于宏观纵向拉伸状态，内部不均匀变形还是导致了局部微观纵向压应力。Barbe 等的分析^[6]也得到多晶体在宏观纵向拉伸下内部产生微观纵向压应力的结果，但没有作统计分析，所讨论的应变范围也很小 (< 15%)。

多晶集合体内由于晶粒间滑移系位向不同，晶粒间变形会很不均匀，从而造成晶间应力急剧变化。

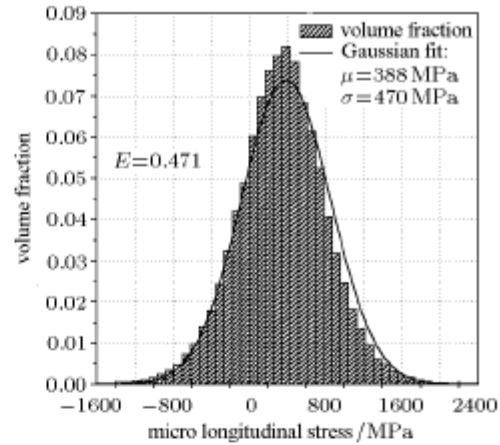


图 4 Voronoi 多晶体内纵向应力的统计分布

Fig.4 Statistical distribution of longitudinal stress in a Voronoi tessellation

图 5 显示出 Voronoi 多晶集合体中三轴拉伸应力在晶界特别是三叉晶界处往往达到区域的最大值。这种结果意味着晶界如果没得到增强，就很可能破坏从晶界开始。

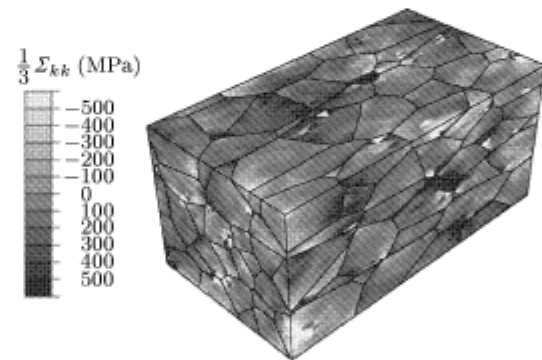


图 5 宏观单轴拉伸下多晶体中三轴拉伸应力分布

Fig.5 The triaxial stress distribution in a Voronoi polycrystal under macro uniaxial tension

多晶体塑性变形的不均匀性的发展也会受到外载荷作用方向的影响，宏观单轴拉伸下沿拉伸方向 45° 是最大剪应力方向，在此方向上可以造成有利于塑性变形的滑移通道。图 6 显示出多晶体内塑性变形沿 45° 方向呈带状分布（色暗的变形小）。

3.4 多晶体的宏观力学行为

多晶体宏观力学行为是众多晶粒的力学行为的集合反映，用 Voronoi 模型可以由晶粒的力学性质计算得到多晶材料平均意义的应力应变曲线。作为初步分析，考虑以下情形：（1）分别沿 1, 2, 3 方向

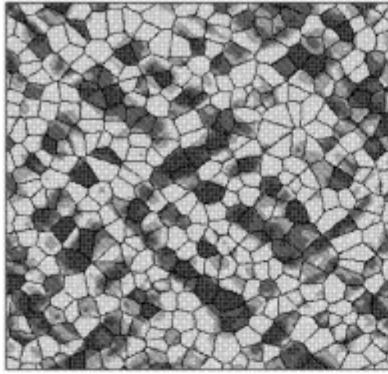


图 6 多晶体内塑性变形的带状分布

Fig.6 The plastic deformation strip in a Voronoi polycrystal (the brighter the larger in plastic deformation)

作单轴拉伸；(2) 在不同应力三轴性参数控制下作三轴拉伸(指宏观三轴都受拉伸应力)；(3) 平面应变压缩：3 方向压缩、2 方向约束宏观应变 ($E_{22} = 0$)、1 方向表面自由。

图 7 给出 Voronoi 集合体沿 1, 2, 3 方向分别受单轴拉伸的宏观单轴应力应变曲线, 其差异很小, 因此多晶体在这种路径不变的载荷作用下的应力响应可以看作是各向同性的. 另外, 图中还给出了单晶分别在 [001], [011] 和 [111] 方向单轴拉伸的纵向

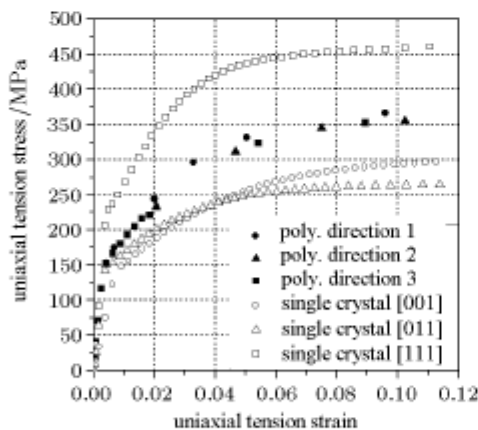
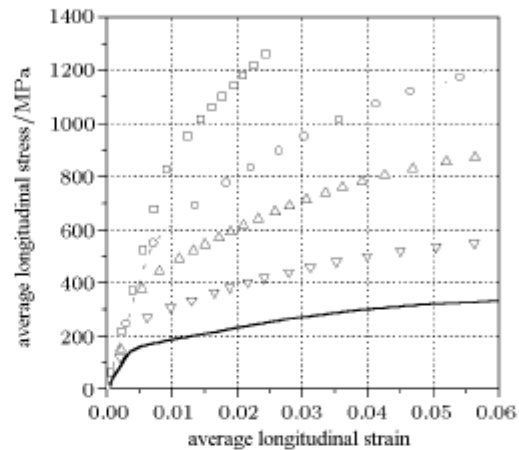


图 7 Voronoi 集合体沿不同方向拉伸的宏观等效应力应变曲线及与单晶拉伸曲线的比较

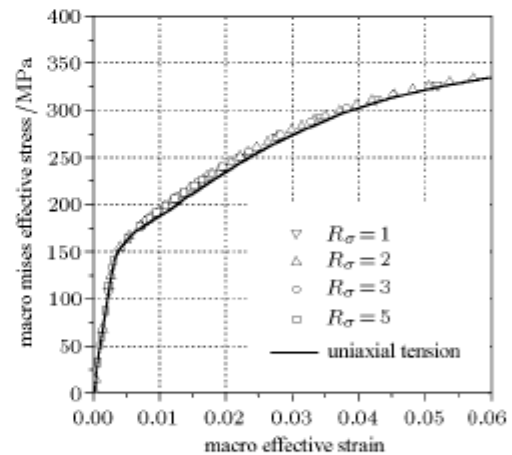
Fig.7 Macro uniaxial stress-strain curves tensioned in different directions for a Voronoi polycrystal and uniaxial curves for a single crystal under tension in various directions

拉伸应力应变曲线. 由曲线比较可知多晶体材料晶粒随机分布产生的平均效应使得多晶体变形抗力低于单晶硬位向的变形抗力但高于单晶软位向的变形抗力.

图 8 给出多晶集合体在不同应力三轴性参数 ($R_\sigma = \Sigma_{kk}/(3\Sigma_{eq})$, Σ_{eq} 是宏观 Mises 等效应力) 控制下作三轴拉伸的宏观等效应力应变曲线, 尽管不同三轴状态下应力分量差异很大(图 8(a)), 但宏观等效应力应变曲线(图 8(b)) 近似相同.



(a)



(b)

图 8 (a) 不同应力三轴度下的主拉伸应力, (b) 不同应力三轴度下的宏观等效应力应变曲线

Fig.8 The stresses for a Voronoi polycrystal under different triaxial tension: (a) Longitudinal stress versus longitudinal strain; (b) von Mises effective stress versus effective strain

图 9 给出单轴拉伸与平面应变压缩结果的比较, 图中显示这两者宏观等效应力应变曲线在硬化过程中有大于 10% 的差异. 这表明在滑移模式控制下的塑性变形导致材料宏观硬化响应受到加载方式的强烈影响.

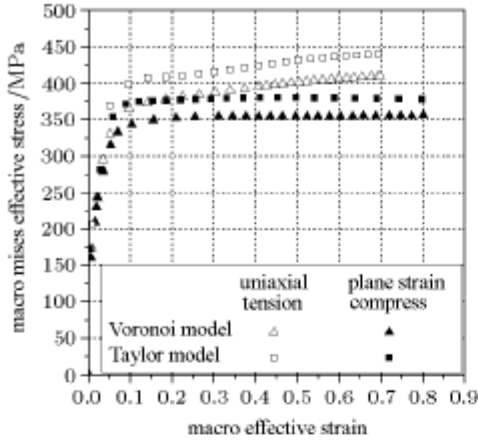


图 9 多晶集合体模型和 Taylor 模型的单轴拉伸和平面应变压缩等效应力应变曲线比较

Fig.9 Macro Mises effective stress-strain curves for three models respectively under uniaxial tension and plane strain compression

以往对多晶体力学行为的研究多建立在 Taylor 假设基础上, 即设多晶体中各晶粒体积相同、变形相同且等于宏观变形. 作为比较, 对 200 个体积相同的单晶晶粒(每个晶粒用一个正六面体单元来计算)的多晶集合, 作者采用 Taylor 假设计算得到了单轴拉伸和平面应变压缩的等效应力应变曲线. 与 Voronoi 模型的结果比较见图 9, 所得宏观等效应力应变曲线差异并不太大, 两者在单轴拉伸和平面应变压缩上宏观曲线的差异十分相近. 图中 Taylor 假设计算的结果(上限解)均分别高于 Voronoi 模型的相应结果. 不同模型所得宏观平均结果的差异小于不同变形模式导致的差异, 尽管两个计算模型存在很大差别: Voronoi 模型的晶粒大小和形状均随机生成, 晶粒间的相互作用比较接近实际状态, 而 Taylor 模型中的晶粒大小、形状、晶粒间的不均匀约束都没有考虑.

3.5 由塑性变形导致的多晶体织构演化

多晶体承受大变形时, 各晶粒的大变形往往伴随着晶粒的晶格刚体旋转, 如果多晶体在外载荷作用下其内部晶粒转动有占优取向的话, 就会生成明显的织构. 可采用有限元方法作织构分析, 但以往的分析或采用 Taylor 假设, 或采用一个晶粒一个单元的多晶集合体(不用相同变形假设)来进行. 考虑晶粒大小、形状随机分布和晶粒间不均匀约束的织构分析尚未见到. 作者对上节用 Voronoi 多晶模型进行单轴拉伸和平面应变压缩计算得到的结果作了织构分析, 用高斯积分点(代表晶粒内的物质点)的晶格旋转数据作极图计算, 得到了 Voronoi 多晶模型单

轴拉伸和平面应变压缩的 $\langle 111 \rangle$ 织构极图(见图 10). 根据计算结果, 单轴拉伸和平面应变压缩这两种加载方式下得到的宏观应力应变曲线(见图 9)和织构极图都有明显的差异, 这在一定程度上表明材料的力学行为与微结构演化是相关联的. 在此指出, 与现有织构分析方法比较, 用 Voronoi 多晶模型作织构分析可以同时计算织构演化过程中晶粒内和晶粒间的应力和变形, 及其统计分布.

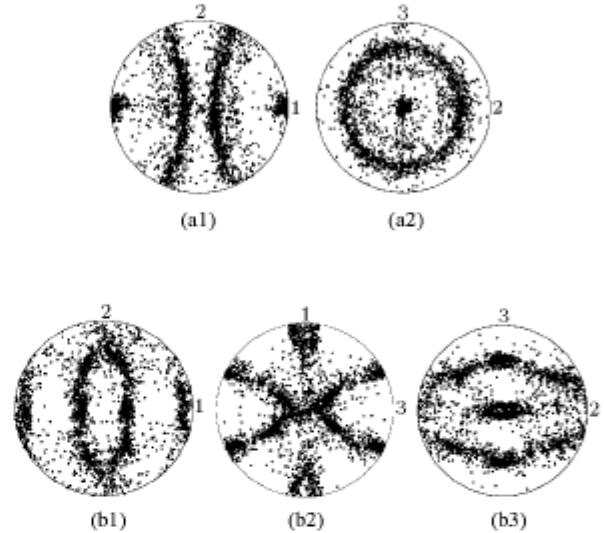


图 10 单轴拉伸和平面应变压缩的多晶体织构演化的 $\langle 111 \rangle$ 极图. (a) 1 方向拉伸, 单轴拉伸应变 $E_{11} = 0.70$; (b) 平面应变压缩(3 方向压缩, 2 方向约束, 1 方向自由), 等效应变 $E_{eq} = 0.8$

Fig.10 The $\langle 111 \rangle$ pole figures of the texture of Voronoi polycrystal under uniaxial tension and plane strain compression: (a) tension is applied in direction 1, uniaxial tension strain $E_{11} = 0.7$; (b) compression is applied in direction 3, with normal constraint in direction 2 and free condition in direction 1, effective strain $E_{eq} = 0.8$

4 简短的讨论与结论

金属多晶材料是使用最广泛的材料, 这类材料微观上是不均匀的、各向异性的, 通常意义下材料“点”的应力实际是包含很多晶粒的材料微元的平均应力. 对于结构的宏观变形和受力分析来说, 材料微元内部应力的不均匀性和分布特性不需要加以考虑. 但对于发生在材料微元内的损伤和破坏过程来说, 多晶体内部应力的不均匀性和分布特性可能具有重要的特殊意义.

本文采用晶体塑性分析方法对 Voronoi 多晶集合体模型进行了细观力学行为和宏观响应的初步数

值模拟研究. 在本文考虑的条件下所得到的结果表明:

(1) 多晶体内等效塑性应变和应力分量的分布统计上具有高斯分布的特点.

(2) 多晶体内等效塑性应变和应力分量统计分布的参数随塑性变形而变化, 其中应力分量分布的差异(用统计变异系数表示)随塑性变形增加有显著增加.

(3) 多晶集合体内由于晶粒随机取向、晶粒间滑移系位向不同, 晶粒间的塑性滑移受到强烈约束, 晶粒间的应力和变形会很很不均匀: 轴向拉伸应变的最大值与平均值之比可以超过 40%, 而轴向应力最大值与平均值之比可超过 3 倍.

(4) 多晶体内最高三轴拉应力一般出现在晶界特别是三晶交界处.

(5) 用 Voronoi 多晶集合体可以计算得到沿最大剪应力方向的变形带, 这是最大剪应力造成滑移通道和多滑移联合造成的结果.

(6) Voronoi 模型计算的单轴拉伸和平面应变压缩结果的比较表明, 两者宏观等效应力应变曲线的差异在硬化过程中可以大于 10%, 意味着多晶材料的硬化与应力状态和加载方式有关, 而不考虑加载方式的硬化描述会有一些的误差.

(7) 进一步的织构分析证实这两种不同加载作用下多晶体的织构演化也不相同, 说明材料的力学行为与微结构演化存在一定的关联.

需要指出: (1) 人们对晶体的塑性变形机制目前还不是十分清楚, 只考虑滑移似乎还是不够的; (2) 由于试验上的困难, 相关理论、数值模型及数值模拟研究十分必要; (3) 对于不均匀有限变形情形, 有限元单元选择对结果有一定影响, 如何更有效和更合理地建立多晶几何模型还有待进一步的工作; (4) 要进一步考虑晶界及相结构的影响. 本文工作仅是一个开端, 望得到支持和指正.

致谢 Wu M. S. 教授(南洋理工大学)和 Feng R. Q. 教授(University of Nebraska)曾邀作者合作进行多晶陶瓷冲击破坏研究(该研究对本文工作有所启发), 并曾对本文研究提供过有益建议; 薛生强硕士(University of Nebraska, 现在 University of Cambridge)对模型网格划分提供过帮助; 西北工业大学张光副教授对织构计算检验提供过帮助; 谨在此表示最诚挚的谢意.

参 考 文 献

- 1 Taylor GL. Plastic strain in metals. *J Inst Metals*, 1938, 62: 307~324
- 2 Budiansky B, Wu TT. Theoretical prediction of plastic strain of polycrystals. In: Proc. 4th US National Congr Appl Mech, 1962. 1175~1185
- 3 Hill R. Continuum micro-mechanics of elastoplastic polycrystals. *J Mech Phys Solids*, 1965, 13: 89~101
- 4 Hutchinson JW. Elastic-plastic behavior of polycrystalline metals and composites. *Proc Roy Soc Lond*, 1970, A319: 247~272
- 5 Kuroda M, Tvergaard V. A phenomenological plasticity model with non-normality effects representing observations in crystal plasticity. *J Mech Phys Solids*, 2001, 49: 1239~1263
- 6 Barbe F, Forest S, Cailletaud G. Intergranular and intragranular behavior of polycrystalline aggregates. *Int J Plasticity*. 2001, 17: 513~563
- 7 Hill R, Rice JR. Constitutive analysis of elastic-plastic crystal at arbitrary strain. *J Mech Phys Solids*, 1972, 20: 401~413
- 8 Asaro RJ, Rice JR. Strain localization in ductile single crystals. *J Mech Phys Solids*, 1977, 25: 309~338
- 9 Peirce D, Asaro RJ, Needleman A. Material rate dependence and localized deformation in crystalline solids. *Acta Metall*, 1983, 31: 1951~1976
- 10 Kalidindi SR, Bronkhorst CA, Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals. *J Mech Phys Solids*, 1992, 40: 537~569
- 11 Maniatty AM, Dawson PR, Lee YS. A time integration algorithm for elasto-viscoplastic cubic crystals applied to modeling polycrystalline deformation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1992, 35: 1565~1588
- 12 Sarma G, Zacharia G. Integration algorithm for modeling the elastoviscoplastic response of polycrystalline materials. *J Mech Phys Solids*, 1999, 47: 1219~1238
- 13 Hutchinson JW. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials. *Proc Roy Soc Lond*, 1976, A348: 101~127
- 14 Asaro RJ, Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall*, 1985, 33: 923~953
- 15 Hibbit Karlsson, Sorenson. ABAQUS Reference Manuals, V6.2, 2001.
- 16 张克实. 变温情形下单晶体热-黏塑性有限变形的分析方法. 机械科学与技术, 2001, 20(增刊): 1~4 (Zhang Keshi. A computational algorithm for thermo-visco-plasticity of a single crystal under anisothermal conditions. *Mechanical Science and Technology*, 2001, 20(suppl): 1~4 (in Chinese))
- 17 黄克智, 黄永刚. 固体本构关系. 北京: 清华大学出版社, 1999 (Hwang Kehchih, Huang Yonggang. Constitutive Relations of Solids. Beijing: Tsinghua University Press, 1999 (in Chinese))

MICROSCOPIC HETEROGENEITY AND MACROSCOPIC MECHANICAL BEHAVIOR OF A POLYCRYSTALLINE MATERIAL¹⁾

Zhang Keshi

(Department of Engineering Mechanics, University of Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(School of Civil and Architectural Engineering, Guangxi University, Nanning 530004, China)

Abstract The micromechanical heterogeneous states of plastic deformation and stress of polycrystalline materials are analyzed on the basis of a microscopic model of crystal plasticity, taking into account the randomness of the crystal grain geometry and the anisotropy of crystal slip. The major aspects of the work are: (1) an iterative algorithm is developed for single-crystal plasticity incremental constitutive relations under the current configuration, in which the basic variable for iteration is the Cauchy stress tensor, (2) the polycrystal is modeled by Voronoi tessellation with randomly oriented crystallographic orientations, the heterogeneous local stress and strain distributions and their statistical characteristics are analyzed in detail, and (3) the macroscopic response with its texture evolution of the polycrystal under respectively uniaxial tension and plane strain compression are simulated. The simulation results show that: (1) the stress components and effective plastic strain in the Voronoi polycrystal aggregate have the statistical feature of Gaussian like distribution, and the ratio of the standard deviation σ to the mean μ of the microscopic longitudinal stresses in the polycrystalline aggregate increases with the plastic strain; (2) the simulated plastic zones in the polycrystal aggregate appear in the direction of maximum macroscopic shear stress; (3) the microscopic stresses are highly heterogeneous, and very large triaxial stress generally appear at the grain boundaries and the triple junctions; (4) Voronoi model can be used to texture analysis.

Key words anisotropy, crystal viscoplasticity, Voronoi polycrystal tessellation, random orientation, stress inhomogeneous

Received 13 November 2003, revised 9 July 2004.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (19972055, 10472092) and the Aviation Science Foundation (04C53027).