

# **材料用户子程序**

——将单晶体本构引入到 ABAQUS 有限元程序中

黄永刚

哈佛大学应用科学部

马萨诸塞州剑桥市

**02138**

一九九一年六月

## 摘要

本文编写了一份将单晶塑性力学引进 ABAQUS 有限元程序的材料用户子程序，并回顾了单晶弹塑性和粘塑性形变的有限元公式，包含了小变形理论和严格的有限应变和旋转理论的描述。单晶体非弹性变形源于晶面滑移，在这里假定它符合施密特法则。滑移系中分解剪切应力和应变之间的各种自身的和潜在的强化关系在子程序中以选项的方式出现和引入。

## 1. 介绍

ABAQUS 有限元程序在固体变形和应力分析中被广泛地应用。ABAQUS 除了给出广泛的本构模型，同时也提供了一个可供用户编写自定义的本构模型子程序（UMAT）的界面。ABAQUS 将以增量的解法来求出应力、应变以及其他的依赖结果的状态变量。当 UMAT 子程序被调用时，ABAQUS 将会给出增量步开始前的状态量（应力以及其他的依赖结果的状态变量）、应变增量以及时间增量。UMAT 子程序有两个作用：在增量步结束时，能够更新应力以及其他依赖结果的状态量的值，同时按要求提供本构模型的材料雅可比矩阵和  $\partial \Delta \sigma / \partial \Delta \epsilon$ ，以便运用牛顿拉普森迭代法求解。

本篇文章的主旨是为 ABAQUS 软件提供一个连续介质框架下的描述单晶本构关系的材料用户子程序。这里的运动学描述是建立在由 Rice（1971）、Hill 和 Rice（1972）给出的框架下的，并严格考虑了有限变形的影响。塑性变形假定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。滑移系上的 Schmid 应力，也就是分解剪应力被假定为滑移的驱动力。该子程序的应

用为利用 ABAQUS 进行单晶或双晶的应力和断裂分析提供了可能。单晶的有限元分析首先是 Peirce、Asaro 和 Needleman（1982，1983）进行研究的。

## 2.单晶体弹塑性本构方程的回顾

### 2.1 运动学

这里所概述的晶体运动学理论根据的是泰勒的开创性的工作以及 Hill（1966）、Rice（1971）、Hill 和 Rice（1972）提出的精确的数学理论。下面是依据 Asaro 和 Rice（1977）、Asaro（1983）等人的工作对这些理论的简要总结。

结晶材料是嵌入在承受弹性变形和转动晶格上的。单晶的非弹性变形假定只从结晶滑移中产生。通过位错运动使物质在晶格中流动。总变形梯度  $F$  这样给定：

$$F = F^* \cdot F^P \quad (2.1.1)$$

其中  $F^P$  指的是取向和间距与原始参考构型相同的中间参考构型上的材料塑性剪切， $F^*$  指的是晶格的拉伸和旋转。在某种意义上说应力只由  $F^*$  决定，所以弹性性能假定不受滑移的影响。 $F^P$  的变化率与  $\alpha$  滑移系的滑移率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  有关系如下：

$$\dot{F}^P \cdot F^{P-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} m^{(\alpha)} \quad (2.1.1a)$$

其中求和范围包括所有开动的滑移系，矢量  $s^{(\alpha)}$  和  $m^{(\alpha)}$  分别是参照构型中的滑移方向向量和滑移面的法向方向向量。

矢量  $s^{(\alpha)}$  定义为变形构型中  $\alpha$  滑移系的滑移方向向量：

$$s^{*(\alpha)} = F^* \cdot s^{(\alpha)} \quad (2.1.2a)$$

一个与滑移面上所有向量互异（垂直）的滑移面法线方向向量定义为：

$$m^{*(\alpha)} = m^{(\alpha)} \cdot F^{*-1} \quad (2.1.2b)$$

当前状态的速度梯度为：

$$L = \dot{F} \cdot F^{-1} = D + \Omega \quad (2.1.3)$$

对称拉伸率矩阵  $D$  和反对称旋转矢量  $\Omega$  均如下分解为晶格分量与塑性分量：

$$D = D^* + D^P, \quad \Omega = \Omega^* + \Omega^P \quad (2.1.4)$$

并满足：

$$D^* + \Omega^* = \dot{F}^* \cdot F^{*-1}, \quad D^P + \Omega^P = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{*(\alpha)} m^{*(\alpha)} \quad (2.1.5)$$

## 2.2 本构关系

按照 Hill 和 Rice（1972）的研究，弹性势  $\Phi = \Phi(F^*)$  的存在，确定了晶格的对称拉伸率  $D^*$  与柯西应力焦曼率  $\overset{\nabla}{\sigma}^*$  关系为：

$$\overset{\nabla}{\sigma}^* + \sigma(I : D^*) = L : D^* \quad (2.2.1)$$

$I$  为二阶单位张量， $L$  为具有一组完全对称特性（ $L_{ijkl} = L_{jikl} = L_{ijlk} = L_{klij}$ ）的弹性模量张量， $\overset{\nabla}{\sigma}^*$  为晶格旋转轴上的共旋转应力率，它与材料旋转轴上的共旋转应力率  $\overset{\nabla}{\sigma}$  有关系如下：

$$\overset{\nabla}{\sigma}^* = \overset{\nabla}{\sigma} + (\Omega - \Omega^*) \cdot \sigma - \sigma \cdot (\Omega - \Omega^*) \quad (2.2.2)$$

这里有： $\overset{\nabla}{\sigma} = \dot{\sigma} - \Omega \cdot \sigma + \sigma \cdot \Omega$

这里假设晶体滑移遵守施密特定律，也就是在任何特定的  $\alpha$  滑移系上的滑

移率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  假设依赖于只通过所谓的施密特应力  $\tau^{(\alpha)}$  就可得的当前应力  $\sigma$ 。当弹性晶格位错可以忽略时，施密特应力就是剪应力。在有限弹性扭转中出现了很多推广述，Asaro 和 Rice (1977) 对其有所讨论。这里我们使用 Rice (1971) 提出的与滑移共轭热动力学应力，其中 Rice 依据有限变形的工共轭应力和应变度量而精确地保留了小变形理论的正交性描述 (手册, 1965; Hill, 1967; Rice, 1970)。

$$\tau^{(\alpha)} = m^{*(\alpha)} \cdot \frac{\rho_0}{\rho} \sigma \cdot s^{*(\alpha)} \quad (2.2.3)$$

其中  $\rho_0$  和  $\rho$  分别是参考状态和当前状态的质量密度; Hill 和 Rice (1972) 指出  $\tau^{(\alpha)}$  就是  $\tau_s^m$ ，指与晶格牵连的坐标系上的基尔霍夫应力的混合剪切分量  $\tau$ 。这个施密特应力的变化率可以表示为：

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = m^{*(\alpha)} \cdot \left[ \overset{\nabla^*}{\sigma} + \sigma (I : D^*) - D^* \cdot \sigma + \sigma \cdot D^* \right] \cdot s^{*(\alpha)} \quad (2.2.4)$$

### 2.3 率相关晶体材料的强化

Peirce、Asaro 和 Needleman (1983) 指出率相关塑性是率相关粘塑性的极限。本文是在粘塑性的框架下给出了本构方程。许多作者讨论过单晶的强化 (例如，看 Asaro (1983a)、Wu, Bassani 和 Laird (1991) 的评论文章)。基于施密特定律，晶体固体  $\alpha$  滑移系上滑移率  $\tau^{(\alpha)}$  由其相应的分解剪应力  $\tau^{(\alpha)}$  来确定：

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} f^{(\alpha)} \left( \tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)} \right) \quad (2.3.1)$$

这里的常量  $\dot{a}^{(\alpha)}$  为  $\alpha$  滑移系上的参考应变率， $g^{(\alpha)}$  是表示滑移系当前强度的变量，无量纲函数  $f^{(\alpha)}$  是用来描述应变率依赖于应力的关系的通用函数。

Hutchinson 采用幂分布来描述多晶蠕变：

$$f^{(\alpha)}(x) = x|x|^{n-1} \quad (2.3.1a)$$

$n$  为率灵敏指数。当  $n \rightarrow \infty$  时，这个法则又类似于率无关材料的描述。

应变强化通过增量关系用强度  $g^{(\alpha)}$  的演化来描述：

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (2.3.2)$$

$h_{\alpha\beta}$  为滑移硬化模量，且在所有开动的滑移系上进行求和。这里  $h_{\alpha\alpha}$ （不求和）和  $h_{\alpha\beta}$  ( $\alpha \neq \beta$ ) 分别称为自、潜硬化模量。

Peirce, Asaro 和 Needleman (1982)，还有 Asaro (1983a,b) 用幂函数来描述自硬化模量：

$$h_{\alpha\alpha} = (h) = h_0 \sec h^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad (no \text{ sum on } \alpha) \quad (2.3.3a)$$

$h_0$  为初始硬化模量， $\tau_0$  为与当前强度初始值  $g^{(\alpha)}(0)$  相同的屈服应力， $\tau_s$  为阶段 I 的应力（或者说是大塑性流动出现时的突破应力）， $\gamma$  为所有滑移系上泰勒累积剪切应变，它等于：

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t \left| \dot{\gamma}^{(\alpha)} \right| dt \quad (2.3.3b)$$

隐硬化模量这样给定：

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) \quad (\alpha \neq \beta) \quad (2.3.3c)$$

$q$  是一个常量。这些硬化模量的表达忽略了晶体固体中的包辛格效应。

Bassani 和 Wu (1991) 用了一种不同的表达式来描述晶体材料中三个强化阶段的硬化模量。利用所有滑移系上剪切应变  $\gamma^{(\alpha)}$ ，他们给出的表达式为：

$$h_{\alpha\alpha} = \left\{ (h_0 - h_s) \sec h^2 \left[ \frac{(h_0 - h_s) \gamma^{(\alpha)}}{\tau_s - \tau_0} \right] + h_s \right\} G(\gamma^{(\beta)}; \beta \neq \alpha) \quad (no \text{ sum on } \alpha) \quad (2.3.4a)$$

$$h_{\alpha\beta} = qh_{\alpha\alpha} \quad (\beta \neq \alpha) \quad (2.3.4b)$$

新引进量  $h_s$  为阶段 I 强化中的易滑移过程中的硬化模量，函数  $G$  与交互式硬化有关：

$$G(\gamma^{(\beta)}; \beta \neq \alpha) = 1 + \sum_{\beta \neq \alpha} f_{\alpha\beta} \tanh(\gamma^{(\beta)} / \gamma_0) \quad (2.3.4c)$$

$\gamma_0$  为滑移系间相互作用达到峰值强度后的滑移量，每个分量  $f_{\alpha\beta}$  表示特定滑移作用的强度值。例如，共面的相互作用要弱于非共面的相互作用。对于 FCC 单晶体来说，有五个不同的滑移作用，也就是说至多有五个独立的分量  $f_{\alpha\beta}$ 。

这些公式中没有显性屈服；如果一个滑移系上的分解剪应力非零，塑性剪切就存在。然而，对于率灵敏指数  $n$  足够大时 ( $n > 50$ )，分解剪应力小于  $\tau_0$  的滑移系上的塑性剪切率和参考率  $\dot{\alpha}$  相比要小得多。由于所列的公式中都假设所有的滑移系均被开动，其实这是没有必要的，且会在考虑只允许正滑移的分离滑移系上的  $(s^{*(\alpha)}, m^{*(\alpha)})$  和  $(-s^{*(\alpha)}, m^{*(\alpha)})$  时也遇到很多方便。因此，如果只要相应的  $\tau^{(\alpha)}$  为负，我们就允许  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  可以为负，如公式 (2.31a)。

还有其他滑移硬化模型类型 (例如 Zarka, 1975)，这些模型都是基于 (2.3.1) 式和 (2.3.2) 式的通用框架下的，只是其中引入了更多的作为经典塑性理论下的中间变量的参数。

### 3. 向前梯度时间积分格式与增量公式

本文用到了两种时间积分格式。如 3.1 至 3.3 节所述，第一种格式假定在应力增量、应变增量和诸如滑移系中的剪切应变、分解剪应力和当前强度的状态变量的增量呈线性关系。应力和状态变量在时间增量前先计算出来。如 3.4 节中的

讨论，第二种格式利用牛顿拉普森迭代方法来求解非线性增量方程。一种隐式积分格式在时间增量后对应力和状态量进行估计。

### 3.1 时间向前积分格式

子程序中运用了 Peirce, Shih 和 Needleman (1984) 给出的率相关固体的切线模量方法。引入时间增量  $\Delta t$  后，我们定义  $\alpha$  滑移系上的剪切应变  $\gamma^{(\alpha)}$  增量如下：

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)}(t + \Delta t) - \gamma^{(\alpha)}(t) \quad (3.1.1)$$

在  $\Delta t$  中引入线性插值：

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t [(1 - \theta) \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \theta \dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)}] \quad (3.1.2)$$

下标为滑移率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  被计算时的时刻。参数  $\theta$  取值区间  $[0.0, 1.0]$ ，当  $\theta$  等于 0 时对应为简单欧拉时间积分格式。推荐  $\theta$  取值在 0.5 到 1.0 之间。

通常滑移率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  是关于分解剪应力  $\tau^{(\alpha)}$  和当前强度  $g^{(\alpha)}$  的函数，如 (2.3.1) 式。滑移率的泰勒展开为：

$$\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \frac{\partial \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \Delta \tau^{(\alpha)} + \frac{\partial \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Delta g^{(\alpha)} \quad (3.1.3)$$

$\Delta \tau^{(\alpha)}$  和  $\Delta g^{(\alpha)}$  分别是时间增量为  $\Delta t$  时  $\alpha$  滑移系上的分解剪应力和当前强度的增量。公式 (3.1.1) - (3.1.3) 重组后给出下面增量关系：

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t [\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} + \theta \frac{\partial \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \Delta \tau^{(\alpha)} + \theta \frac{\partial \dot{\gamma}_t^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} \Delta g^{(\alpha)}] \quad (3.1.4)$$



### 3.2 增量公式

根据应变增量  $\Delta \varepsilon_{ij}$  与时间增量  $\Delta t$ ，本节演算出所有滑移系上剪切应变增量  $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ 、分解剪应力增量  $\Delta \tau^{(\alpha)}$  与当前强度增量  $\Delta g^{(\alpha)}$ 。共回转应力增量  $\Delta \sigma_{ij} = \overset{\nabla}{\sigma}_{ij} \Delta t$  同样依据应变增量  $\Delta \varepsilon_{ij}$  给出。这个应力增量的定义与有限变形分析的 ABAQUS 有限元程序一致。

我可以非常方便地为每个滑移系引入“施密特因子”  $\mu_{ij}^{(\alpha)}$  和张量  $\omega_{ij}^{(\alpha)}$ ：

$$\mu_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left[ s_i^{*(\alpha)} m_j^{*(\alpha)} + s_j^{*(\alpha)} m_i^{*(\alpha)} \right] \quad (3.2.1a)$$

$$\omega_{ij}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left[ s_i^{*(\alpha)} m_j^{*(\alpha)} - s_j^{*(\alpha)} m_i^{*(\alpha)} \right] \quad (3.2.1b)$$

张量  $\omega_{ij}^{(\alpha)}$  与旋转张量  $\Omega$  和  $\Omega^*$  有关：

$$\Omega_{ij} - \Omega_{ij}^* = \sum_{\alpha} \omega_{ij}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \quad (3.2.1c)$$

由晶体滑移通用硬化方程（2.3.2）式有当前硬化函数增量  $\Delta g^{(\alpha)}$  满足以下关系式：

$$\Delta g^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} \quad (3.2.2)$$

分解剪应力增量  $\Delta \tau^{(\alpha)}$  与应变增量  $\Delta \varepsilon_{ij}$ （（2.2.4）式）、弹性本构关系（（2.2.1）式）和分解在晶格部分与塑性部分的应变增量（（2.1.4）式，（2.1.5）式）有关：

$$\Delta \tau^{(\alpha)} = \left[ L_{ijkl} \mu_{kl}^{(\alpha)} + \omega_{ik}^{(\alpha)} \sigma_{jk} + \omega_{jk}^{(\alpha)} \sigma_{ik} \right] \cdot \left[ \Delta \varepsilon_{ij} - \sum_{\beta} \mu_{ij}^{(\beta)} \Delta \gamma^{(\beta)} \right] \quad (3.2.3)$$

$L_{ijkl}$  为弹性模量。共回转应力增量  $\Delta \sigma_{ij}$  由（2.2.2）式给出，如下：

$$\Delta \sigma_{ij} = L_{ijkl} \Delta \varepsilon_{kl} - \sigma_{ij} \Delta \varepsilon_{kk} - \sum_{\alpha} \left[ L_{ijkl} \mu_{kl}^{(\alpha)} + \omega_{ik}^{(\alpha)} \sigma_{jk} + \omega_{jk}^{(\alpha)} \sigma_{ik} \right] \Delta \gamma^{(\alpha)} \quad (3.2.4)$$

对于给定的应变增量  $\Delta \varepsilon_{ij}$ ，滑移系上的剪切应变增量  $\Delta \gamma^{(\alpha)}$  只由下面的代数

方程给出，取代了上面的增量关系式（3.2.2）和（3.2.3）到（3.1.4）而获得：

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} \left\{ \delta_{\alpha\beta} + \theta \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \left[ L_{ijkl} \mu_{kl}^{(\alpha)} + \omega_{ik}^{(\alpha)} \sigma_{jk} + \omega_{jk}^{(\alpha)} \sigma_{ik} \right] \mu_{ij}^{(\beta)} - \theta \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}} h_{\alpha\beta} \operatorname{sign}(\dot{\gamma}_t^{(\beta)}) \right\} \Delta \gamma^{(\beta)} \\ = \dot{\gamma}_t^{(\alpha)} \Delta t + \theta \Delta t \frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \left[ L_{ijkl} \mu_{kl}^{(\alpha)} + \omega_{ik}^{(\alpha)} \sigma_{jk} + \omega_{jk}^{(\alpha)} \sigma_{ik} \right] \Delta \varepsilon_{ij} s^{*(\alpha)} m^{*(\alpha)} \quad (3.2.5) \end{aligned}$$

$\delta_{\alpha\beta}$  为 Kronecker delta。一旦根据应变增量  $\Delta \varepsilon_{ij}$  知道了  $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ ，所有其他增量都可以通过（3.2.2）-（3.2.4）式得出。

### 3.3 晶格旋转

随着晶体的变形晶格承受扭转和旋转作用。然而当所有率实体都在旋转晶格框架（2.1.2ab）（也可看 Asaro 和 Rice, 1977; Asaro, 1983b）下形成时，晶格旋转效应没有显性出现在第 2 节中本构方程中。在变形构形中，晶格变形和旋转可以被与滑移方向  $s^{*(\alpha)}$ 、与滑移面垂直方向  $m^{*(\alpha)}$  一致的互异矢量充分地描述。若对（2.1.2a, b）式进行微分则可得：

$$\dot{s}^{*(\alpha)} = (D^* + \Omega^*) \cdot s^{*(\alpha)} \quad (3.3.1a)$$

$$\dot{m}^{*(\alpha)} = -m^{*(\alpha)} \cdot (D^* + \Omega^*) \quad (3.3.1b)$$

其相应的增量可以依据滑移系上的应变增量  $\Delta \varepsilon_{ij}$  和剪切应变增量  $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ ，来给出：

$$\Delta s_i^{*(\alpha)} = \left\{ \Delta \varepsilon_{ij} + \Omega_{ij} \Delta t - \sum_{\beta} \left[ \mu_{ij}^{(\beta)} + \omega_{ij}^{(\beta)} \right] \Delta \gamma^{(\beta)} \right\} s_j^{*(\alpha)} \quad (3.3.2a)$$

$$\Delta m_i^{*(\alpha)} = -m_j^{*(\alpha)} \left\{ \Delta \varepsilon_{ij} + \Omega_{ji} \Delta t - \sum_{\beta} \left[ \mu_{ji}^{(\beta)} + \omega_{ji}^{(\beta)} \right] \Delta \gamma^{(\beta)} \right\} \quad (3.3.2b)$$

$s^{*(\alpha)}$  与  $m^{*(\alpha)}$  在每个时间步都进行更新，以便于获得当前状态的“施密特因子”  $\mu_{ij}^{(\alpha)}$

和张量  $\omega_{ij}^{(\alpha)}$ 。

### 3.4 非线性增量公式

关于 $\alpha$  滑移系中剪切应变 $\gamma^{(\alpha)}$  的增量方程（3.1.2）式仍然保留，但是在本节中不会将滑移率（3.1.3）式用泰勒展开。3.2 节和 3.3 节中除（3.2.5）式外的所有增量方程均被保留，且由于应力和状态变量是在时间增量后再计算，所以方程变成非线性。关于滑移系上的剪切应变增量 $\Delta\gamma^{(\alpha)}$  的线性方程（3.2.5）式被如下的非线性方程所替换，且该方程是通过将通用滑移率表达式（2.3.1）替换为增量方程（3.1.2）的方式获得：

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} - (1-\theta)\Delta t\dot{\gamma}_t^{(\alpha)} - \theta\Delta t\dot{a}^{(\alpha)} f^{(\alpha)} \left( \frac{\tau_t^{(\alpha)} - \Delta\tau^{(\alpha)}}{g_t^{(\alpha)} - \Delta g^{(\alpha)}} \right) = 0 \quad (3.4.1)$$

分解剪应力增量 $\Delta\tau^{(\alpha)}$  和当前强度增量 $\Delta g^{(\alpha)}$  是 $\Delta\gamma^{(\alpha)}$  的非线性函数，如（3.2.2）式和（3.2.3）式。以上 $\Delta\gamma^{(\alpha)}$  的非线性方程用牛顿拉普森迭代方法求解，这时线性方程（3.2.5）式的求解结果可以作为初始估计值。其它所有增量都通过相同的迭代步骤求得。

## 4. ABAQUS 子程序

### 4.1 自定义材料子程序 UMAT

我们编写了一个可运用于有限元软件 ABAQUS 中的 FORTRAN 子程序 UMAT，它作为如第 3 节中所述的向前梯度时间积分格式下单晶体本构模型的一个材料用户子程序。该子程序包含了小变形理论和有限应变与旋转理论两个选项。在附录 A 中详细讨论了子程序 UMAT 的输入文件格式，并且在附录 C 中给出了一个解决承受单轴拉的伸单晶体棒问题的包含 UMAT 源代码的输入文件作为例子。

在单晶体 UMAT 子程序中，所有滑移系（(2.3.3b) 式所定义）的当前强度  $g^{(\alpha)}$ 、剪切应变  $\gamma^{(\alpha)}$ 、分解剪应力  $\tau^{(\alpha)}$ 、滑移面法向  $m^{*(\alpha)}$ 、滑移方向  $s^{*(\alpha)}$  和总累积剪切应变  $\gamma$  均被认定为依赖结果的状态变量。这些依赖结果的状态变量的输出格式在附录 B 中给出。应力、应变和状态变量用 ABAQUS 软件逐个以增量方式求解出来。当子程序被调用时，ABAQUS 软件为其给定增量开始前的状态（应力、依赖结果的状态变量）和应变值与时间增量。子程序 UMAT 执行两种功能：其一，它能在增量结束时更新应力和依赖结果的状态量；其二，它能为本构模型提供材料雅可比矩阵  $\partial\Delta\sigma/\partial\Delta\varepsilon$ 。由于单晶体模型是运用的率格式且是在子程序中进行数值积分，所以这个矩阵依赖于向前梯度时间积分格式。

UMAT 子程序提供了两种选：其一是利用 3.1 节至 3.3 节中所述的线性化求解程序，并在时间增量步前计算出应力和依赖结果的状态变量；另一种是使用牛顿拉普森迭代方法求解如 3.4 节中所述的非线性方程，并在时间增量结束后计算出应力和依赖结果的状态变量。在非线形求解程序中可以采用较大的时间增量步，这是因为它的增量关系更为稳定。在牛顿拉普森迭代方法是通过忽略滑移面

法线方向增量和滑移方向增量对应变增量的导数  $\frac{\partial \Delta m^*}{\partial \Delta \varepsilon}$  和  $\frac{\partial \Delta s^*}{\partial \Delta \varepsilon}$ ，来使得雅可比矩阵  $\partial \Delta \sigma / \partial \Delta \varepsilon$  得到简化的。当晶格旋转影响没考虑时，这样的简化不会产生误差。如果晶格旋转影响考虑在内的话，误差与 1 相比，大概与弹性应变增量同量级，为  $O(D^* \Delta t)$ 。

ABAQUS 主程序和材料用户子程序之间的界面不会提供公式 (3.3.2ab) 中所用的旋转增量  $\Omega_{ij} \Delta t$ 。但可以从可提供的旋转增量矩阵  $\Delta R$  中推导得来：

$$\Delta R = \left( I - \frac{1}{2} \Omega \Delta t \right)^{-1} \cdot \left( I + \frac{1}{2} \Omega \Delta t \right) \quad (4.1.1)$$

(ABAQUS 理论手册，1989)

目前的 UMAT 子程序是为立方晶体所写，然而在下一节讨论中可知，它可能也可以推广于非立方晶体。子程序可以设每个立方晶体的至多有三组滑移系。在 BCC 金属晶体中可以观测到  $\{110\} \langle 111 \rangle$ ， $\{121\} \langle 111 \rangle$  和  $\{123\} \langle 111 \rangle$  三个滑移系的开动，在 FCC 金属晶体中可以观测到  $\{111\} \langle 110 \rangle$  滑移系的开动（看 Hull 和 Bacon，1984）。

UMAT 子程序中设有七种用户提供的子函数程序 F，DFDX，HSELF，HLATNT，GSLPO，DHSELF 和 DHLATN。它们用来描述晶体滑移与滑移系的硬化。子函数 F 会利用方程 (2.3.1) 式在增量开始前提供出滑移率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ ，子函数 DFDX 则给出它的导数  $\frac{d\dot{\gamma}^{(\alpha)}}{d(\tau^{(\alpha)}/g^{(\alpha)})}$ 。公式 (2.3.1) 中通用函数 f 中利用了幂律分布。子函数 HSELF 和 HLATNT 提供增量公式 (2.3.2) 中定义是自、潜硬化模量。依照附录 A 中讨论的输入文件格式，默认的可以是 Peirce (1982) 和 Asaro (1983a,b) 法则，也可以是 Bassani 和 Wu 公式 (2.3.4)。子函数 GSLPO 提供当前强度初始值  $g^{(\alpha)}(0)$ ，它默认为公式 (2.3.3a) 或 (2.3.4a) 中的屈服应力  $\tau_0$ 。

当使用牛顿拉普森迭代方法时，子函数 **DHSELF** 和 **DHLATN** 才会提供自、潜硬化模量的导数  $\frac{dh_{an}}{d\gamma^{(\beta)}}$ 。

每一个用户提供的函数均假定参考状态中给定的同一类晶体学定义滑移系上的物理变量都相同，它也可以不同于其它组别。换言之，所有参量（如屈服应力、初始硬化模量）在同一类滑移系中是相同的。

如果滑移率表达式依然遵循（2.3.1）中的通用框架，那么可以很容易将滑移率的幂律分布改为其他形式。只有子函数 **F** 和 **DFDX** 需要改变。同样，如果自、潜硬化模量使用不同的公式，那么只有子函数 **HSELF**，**HLATNT** 和 **GSLP0**（如果使用了牛顿拉普森迭代法，则是 **DHSELF** 和 **DHLATN**）需要修改，且只要通用的增量关系式（2.3.2）任然保留着。下一节中将进一步讨论修改。

用户必须在 **ABAQUS** 输入文件中为 **UMAT** 程序提供以下 7 组数据：

- （1）立方晶体的弹性模量；
- （2）各组假定开动的滑移系的编号；

每一组滑移系中的典型的滑移面，例如 **BCC** 晶体的滑移面（110）；同一组滑移系中典型的滑移方向，例如 **BCC** 晶体中滑移方向[111]；

- （3）参考状态全局系统中的立方晶体初始取向；
- （4）依赖分解剪应力和当前强度的滑移率，也就是参考应变率  $\dot{\epsilon}^{(\alpha)}$ ，幂函数指数 **n**；
- （5）自、潜硬化模量；
- （6）向前梯度时间积分参数  $\theta$ ；决定分析中是使用小变形理论还是有限应

变和有限旋转理论参数 **NLGEOM**;

(7) 迭代法相关参数 (如果使用 3.4 节中的方法的话);

在 4.2 节和附录 A 中将会详细讨论输入文件的结构和更详细的数据格式。

在 **UMAT** 程序中,又含有 8 个子程序,**ROTATION**,**SLIPSYS**,**STRAINRATE**,**LATENTHARDEN**,**GSLPINIT**,**ITERATION**,**LUDCMP** 和 **LUBKSB**。前 5 个子程序和 **UMAT** 程序以及子函数的关系如图 1 所示。子程序 **ROTATION** 决定了全局系中一个立方晶体的初始取向,**SLIPSYS** 为参考状态中立方晶体推导出同一组的所有滑移系(滑移方向和滑移面法向方向)。子程序 **STRAINRATE** 需要调用子函数 **F** 和 **DFDX**,并且在增量开始前计算出所有滑移系上的滑移率。如果应用迭代法,**UMAT** 子程序也将会调用子函数 **F**。子程序 **LATENTHARDEN** 会调用子函数 **HSELF** 和 **HLATNT**,并且产生出硬化矩阵,如对角上的自硬化模量和非对角上的潜硬化模量。子程序 **GSLPINIT** 会调用子函数 **GSLP0**,并计算出参考状态中所有滑移系的当前强度的初始值。子程序 **ITERATION** 会调用子函数 **DHSELF** 和 **DHLATN**,为牛顿拉普森迭代方法提供矩阵。最后两个子程序一起用于求解线性方程;**LUDCMP** 利用 LU 分解求解,而 **LUBKSB** 使用二次反代方法求解。

用户如果对包含 **UMAT** 程序的 **INP** 文件的电子复制版感兴趣,可以给美国哈佛大学应用科学部的 **James R.Rice** 写信(e-mail:[RICE@GEMS.HARVARD.EDU](mailto:RICE@GEMS.HARVARD.EDU))来索取,并告诉他你的 **CPU** 远程登录数字,帐户名和其他的地址信息以便可以通过 **FTP** 在他的目录中将文件复制版预定。源代码储存在哈佛大学固体力学组的 **VAX3100** 电脑 **GEMS** 上,并以 **UMATTCRYSPL.INP** 文件形式设置在

GEMS\$DKB500:[RICE]账户上。

## 4.2 使用 UMAT 程序时对 ABAQUS 输入文件的修改

自定义材料程序 UMAT 必须以一个材料定义的形式成为 ABAQUS 输入文件的一个部分。当 INP 文件中语句定义了网格划分，为了引入弹塑性单晶体响应，则下列步骤应该执行：

(1) 输入文件中 \*MATERIAL 卡后面必须有一个 \*USER MATERIAL 卡，来定义单晶体固体。在 \*USER MATERIAL 卡中有 CONSTANTS 和 UNSYMM 两个参量。第一个参量是要求的，它是模型中最大的材料参数号码。在当前的 UMAT 版本中，为了包含 4.1 节中所有 7 组数据，所以这个号码设为 160。附录 A 中给出了详细的关于输入文件格式的信息。一般情况下雅可比矩阵  $\partial \Delta \sigma / \partial \Delta \varepsilon$  不对称，第二个参量 UNSYMM 会被使用。当变形很小或者没有滑移硬化时，该参量会被忽略。

(2) 执行 \*DEPVAR 卡时，用户必须提供依赖结果的状态变量的个数。这个数等于独立滑移系个数 NSLPTL 的 9 倍再加上 5， $9*NSLPTL+5$ 。如 2.3 节中的讨论，对于立方晶体而言，滑移系  $(-s^{*(\alpha)}, m^{*(\alpha)})$  不算作与  $(s^{*(\alpha)}, m^{*(\alpha)})$  互为独立。在每个滑移系中有 9 个结果依赖状态变量，也就是当前强度  $g^{(\alpha)}$ 、剪切应变  $\gamma^{(\alpha)}$ 、分解剪应力  $\tau^{(\alpha)}$ 、滑移面法向  $m^{*(\alpha)}$ 、滑移方向  $s^{*(\alpha)}$  和总累积剪切应变  $\gamma$  均被定位依赖结果的状态变量。对于 FCC 金属晶体，结果依赖状态变量数可以达到 113 ( $=9*12+5$ )。

(3) \*USER SUBROUTINE 卡后必须有 UMAT 的源代码。

(4) 为了考虑单晶体中有限应变和有限旋转的影响，用户必须给参量



NLGEOM 一个非零值。同时，用户必须在 INP 文件的\*STEP 卡中指明几何的非线性。

UMAT 程序中 160 个材料参数以每张卡 8 个的形式放入 20 个数据卡中，这些数据卡为了 7 组输入数据而按以下方式归类：3 张卡用于单晶体弹性模量，4 张用于假设开动的滑移系，2 张用于晶体的初始取向，3 张用于滑移率的依赖，6 张用于自、潜硬化模量，1 张用于时间积分格式和有限变形分析，1 张用于迭代方法。进一步的信息在附录 A 中讨论。

在双晶体或者包含 2 种以上晶体的多晶体分析时，用户必须为每种材料都重复以上的步骤。更特殊的是，用户必须为每个单晶体，给出\*USER MATERIAL 卡后相应的 20 张数据卡和\*DEPVAR 卡后依赖结果的状态变量的个数。\*USER SUBROUTINE 卡后的 UMAT 程序的源代码不需要重复。