

晶体塑性有限元方法的理论及应用

张旭

西南交通大学力学与工程学院

2021年1月13日星期三

- 1. 金属力学性质的微观理论**
 - 1.1 金属材料的多尺度力学行为**
 - 1.2 金属材料的微结构与变形机理**
- 2. 晶体塑性本构理论**
- 3. 晶体塑性理论的有限元实现**
- 4. 应用案例**

1.1 金属材料的多尺度力学行为

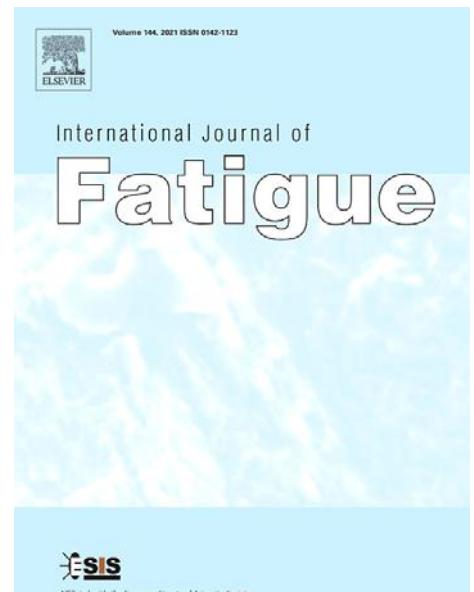


金属与合金

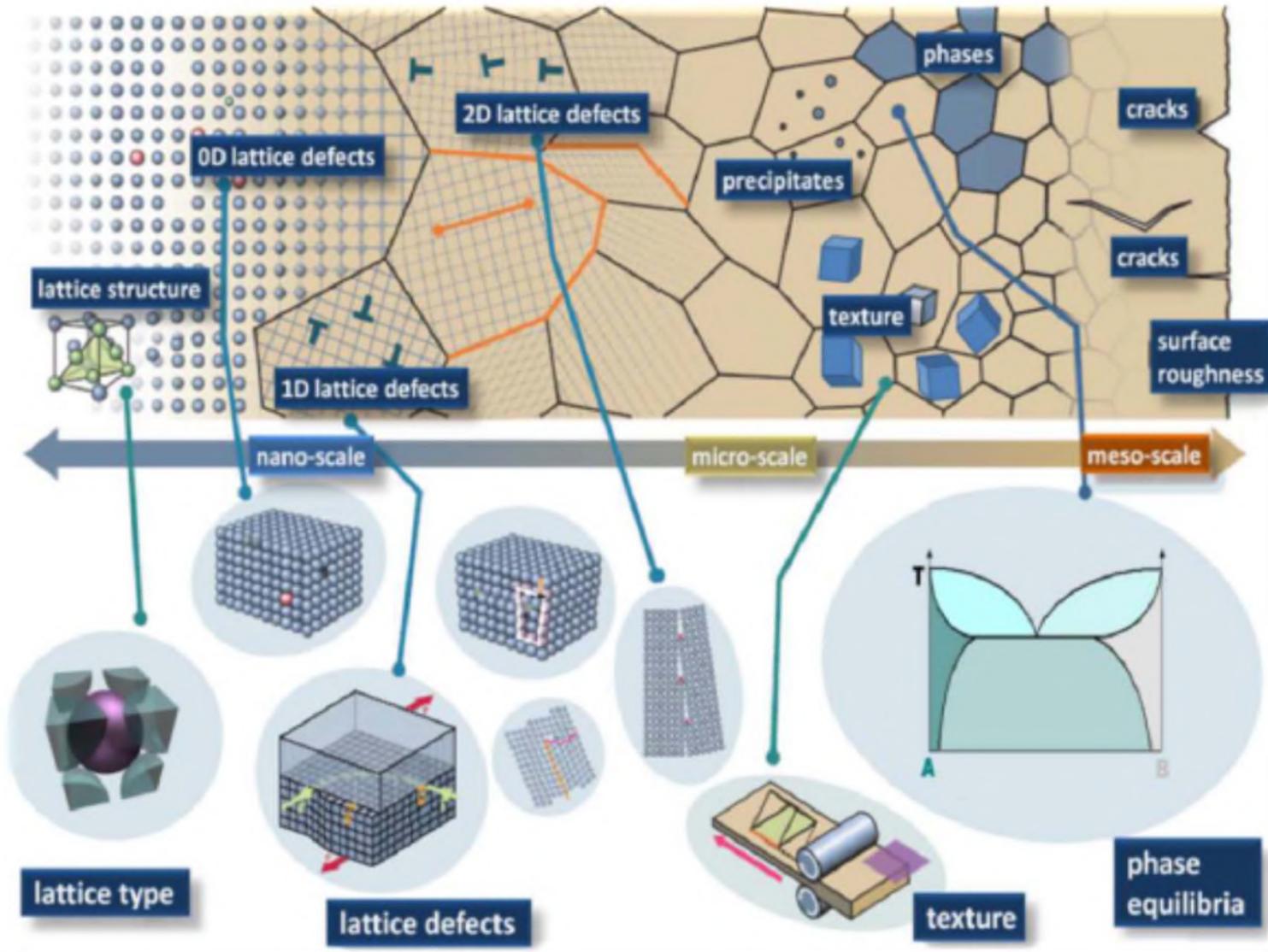
金属和合金在我们的日常生活和工业中广泛应用



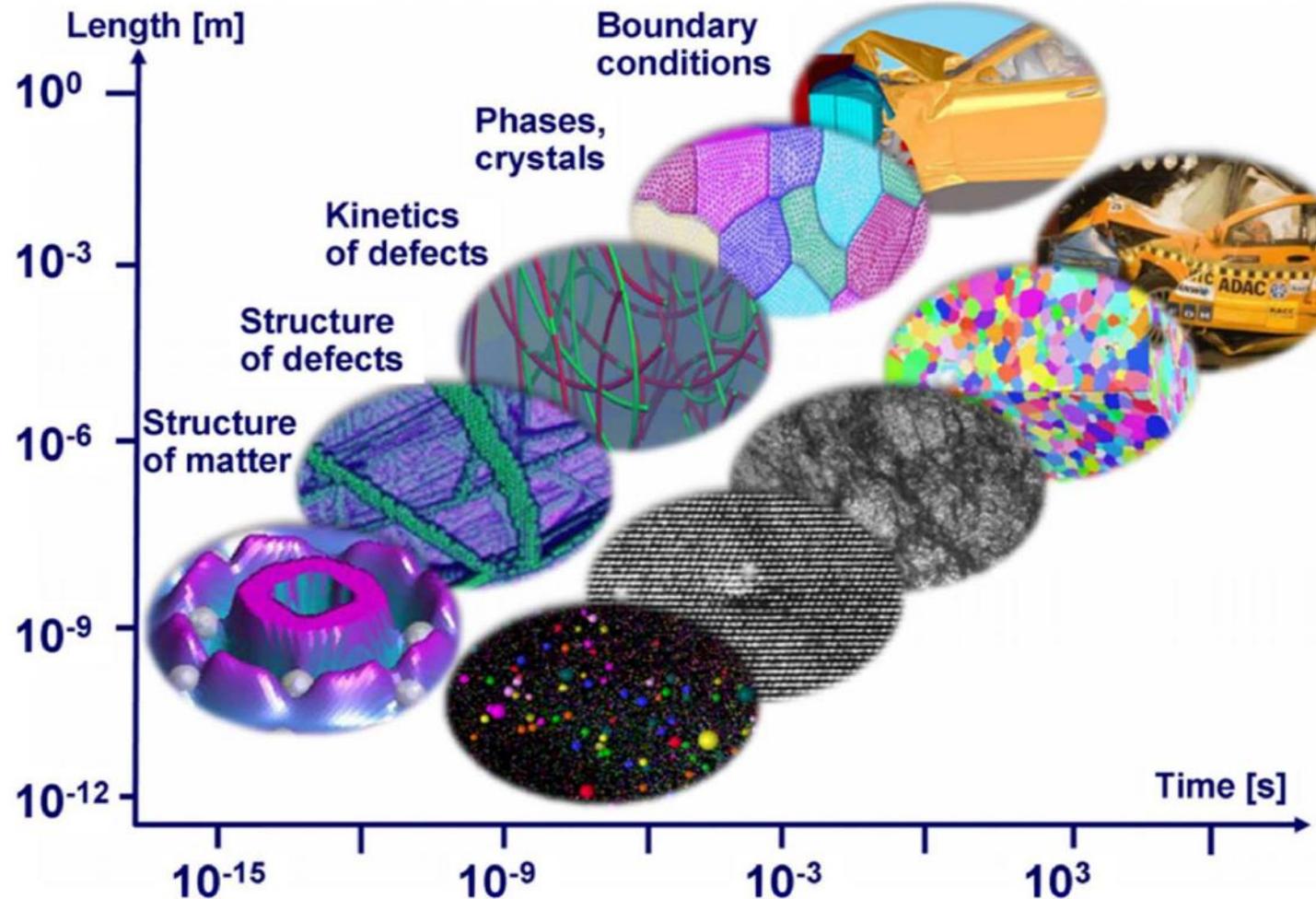
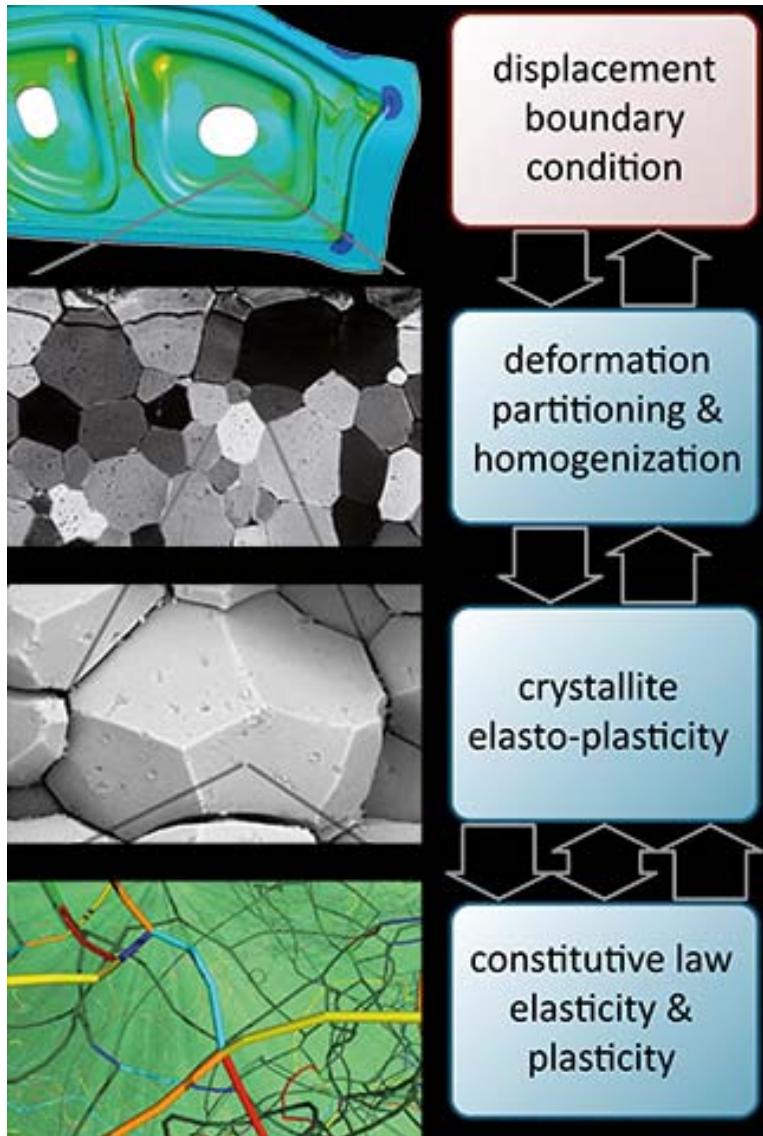
材料的弹性、塑性、疲劳与断裂等力学行为对结构的安全服役至关重要



1.1 金属材料的多尺度力学行为



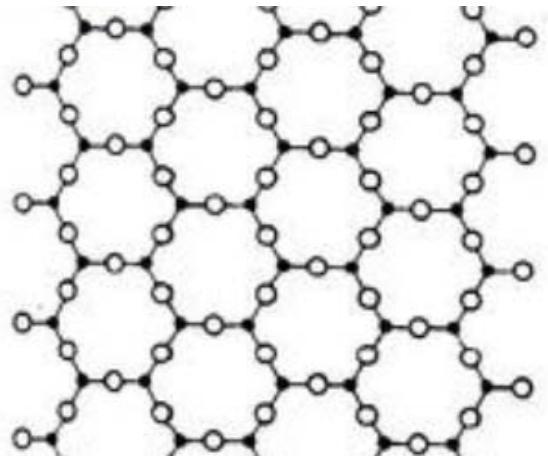
1.1 金属材料的多尺度力学行为



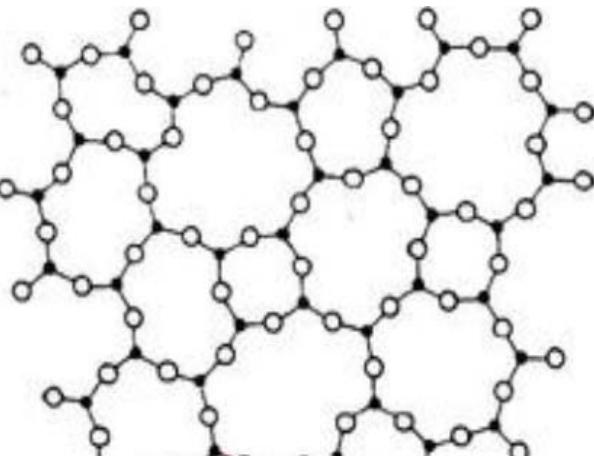
1.2 金属材料的微结构与变形机理



固体物质分类



晶态结构示意图



非晶态结构示意图

固体物质按照微粒的排列特点分为：**晶体、准晶体和非晶体。**

晶体：具有长程有序及平移对称性；

准晶体：长程无序；

非晶体：具有长程有序但不具备平移对称性。

1.2 金属材料的微结构与变形机理

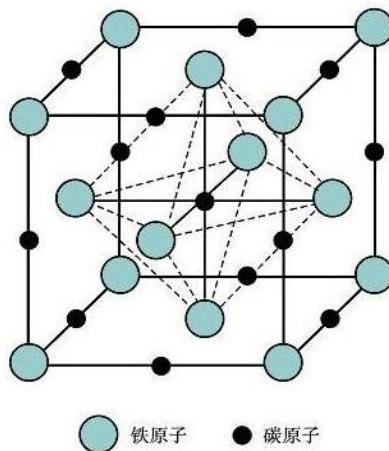


晶体与晶格

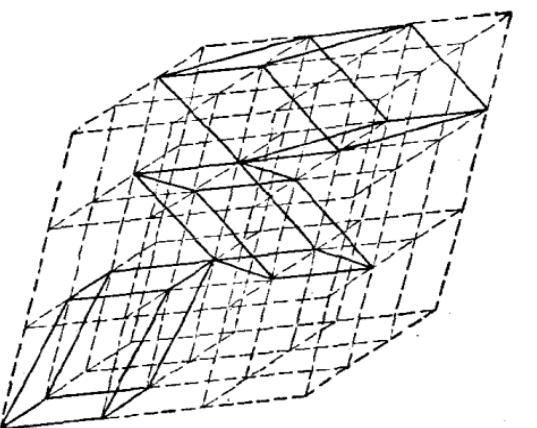
晶体：由离子、原子或分子规律构成，即构成晶体的质点按一定规律排列，同时质点在空间的分布具有周期性和对称性。

晶格：晶体几何抽象化的产物。

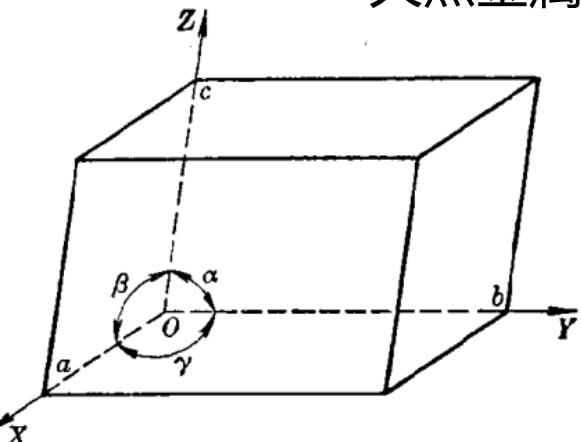
晶胞：最小的晶格单位。



晶体结构



晶格



晶胞



天然金属晶体

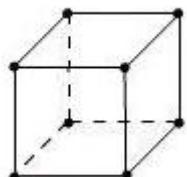
1.2 金属材料的微结构与变形机理



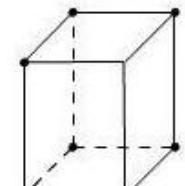
晶体与晶格

晶格类型与详细信息

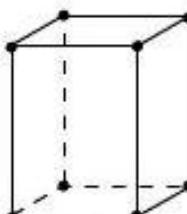
类型	轴晶	轴间夹角
立方 (Cubic)	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
正方 (Tetragonal)	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
正交 (Orthorhombic)	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
六方 (Hexagonal)	$a=b \neq c$	$\alpha=\beta=90^\circ; \gamma=120^\circ$
菱形 (Rhombohedral)	$a=b=c$	$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$
单斜 (Monoclinic)	$a \neq b \neq c$	$\alpha=\beta=90^\circ; \gamma \neq 90^\circ$
三斜 (Triclinic)	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$



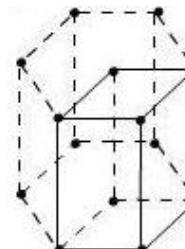
(a)立方



(b)正方



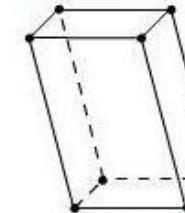
(c)正交



(d)立方



(e)菱形



(f)单斜



(g)三斜

1.2 金属材料的微结构与变形机理



晶体弹性性质

对大多数材料其弹性行为可通过Hooke定律描述，即

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

考虑对称性

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji} \quad \varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$$

在三维应力状态下，一点的应力应变关系可描述为

$$\sigma_x = c_{11}\varepsilon_x + c_{12}\varepsilon_y + c_{13}\varepsilon_z + c_{14}\gamma_{xy} + c_{15}\gamma_{yz} + c_{16}\gamma_{zx}$$

$$\sigma_y = c_{21}\varepsilon_x + c_{22}\varepsilon_y + c_{23}\varepsilon_z + c_{24}\gamma_{xy} + c_{25}\gamma_{yz} + c_{26}\gamma_{zx}$$

$$\sigma_z = c_{31}\varepsilon_x + c_{32}\varepsilon_y + c_{33}\varepsilon_z + c_{34}\gamma_{xy} + c_{35}\gamma_{yz} + c_{36}\gamma_{zx}$$

$$\tau_{xy} = c_{41}\varepsilon_x + c_{42}\varepsilon_y + c_{43}\varepsilon_z + c_{44}\gamma_{xy} + c_{45}\gamma_{yz} + c_{46}\gamma_{zx}$$

$$\tau_{yz} = c_{51}\varepsilon_x + c_{52}\varepsilon_y + c_{53}\varepsilon_z + c_{54}\gamma_{xy} + c_{55}\gamma_{yz} + c_{56}\gamma_{zx}$$

$$\tau_{zx} = c_{61}\varepsilon_x + c_{62}\varepsilon_y + c_{63}\varepsilon_z + c_{64}\gamma_{xy} + c_{65}\gamma_{yz} + c_{66}\gamma_{zx}$$

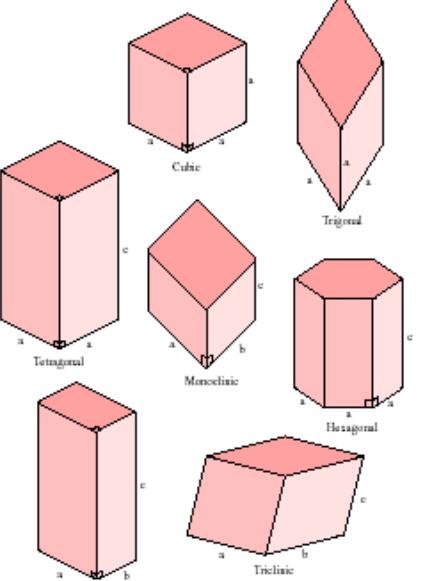
材料类型	各向异性	有一个弹性对称面	正交各向异性	横观各向同性	完全各向同性
独立弹性常数	21	13	9	5	2

1.2 金属材料的微结构与变形机理



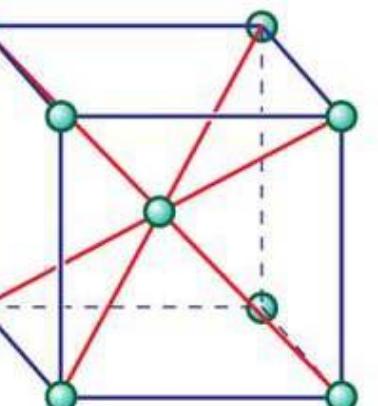
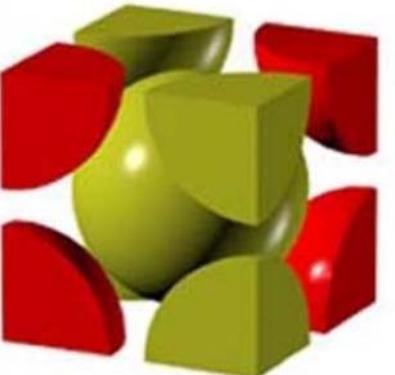
★ 晶体

- 三斜 (21)
- 单斜 (13)
- 正交 (9)
- 三角 (9)
- 八方 (7)
- 六方 (5)
- 立方 (3)

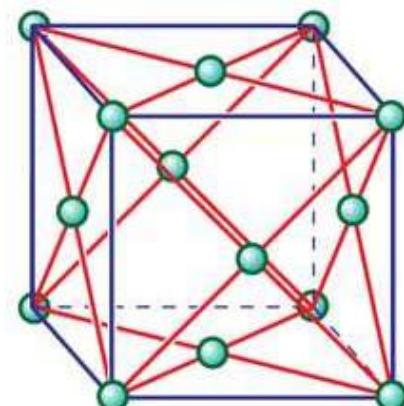
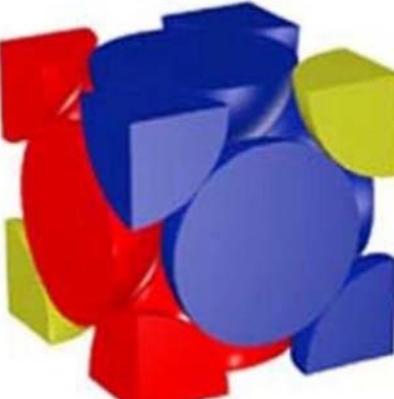


The Seven Crystal Systems

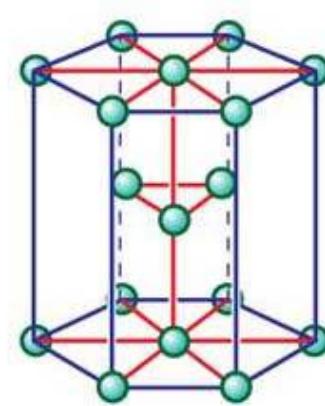
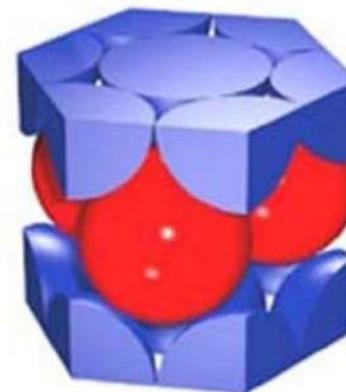
体心立方结构



面心立方结构



密排六方结构



晶体类型

FCC

BCC

HCP

所需弹性常数

C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44}

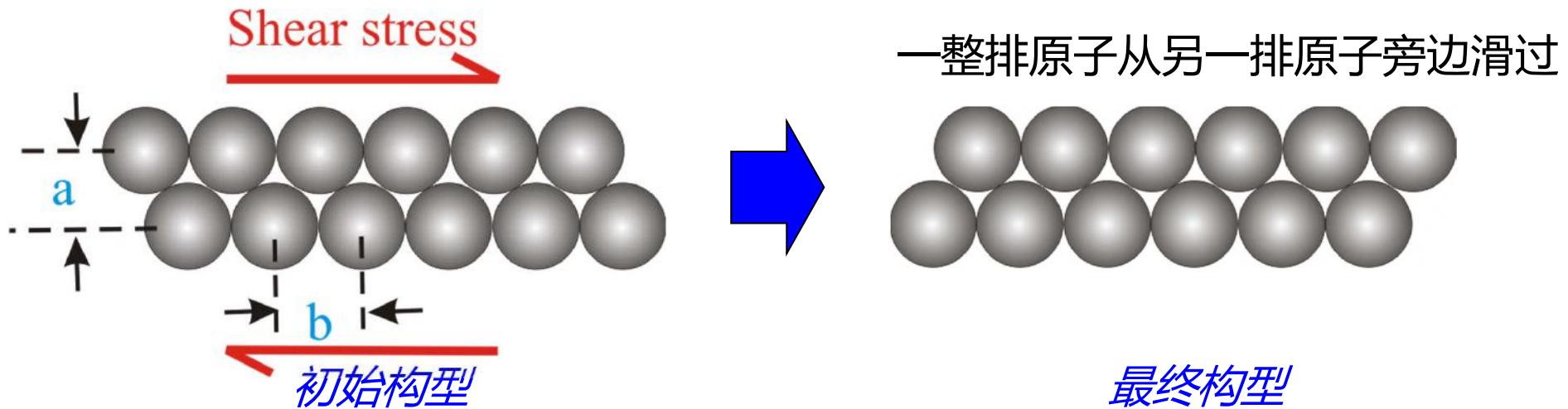
C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44}

C_{11} 、 C_{12} 、 C_{13} 、 C_{33} 、 C_{44}

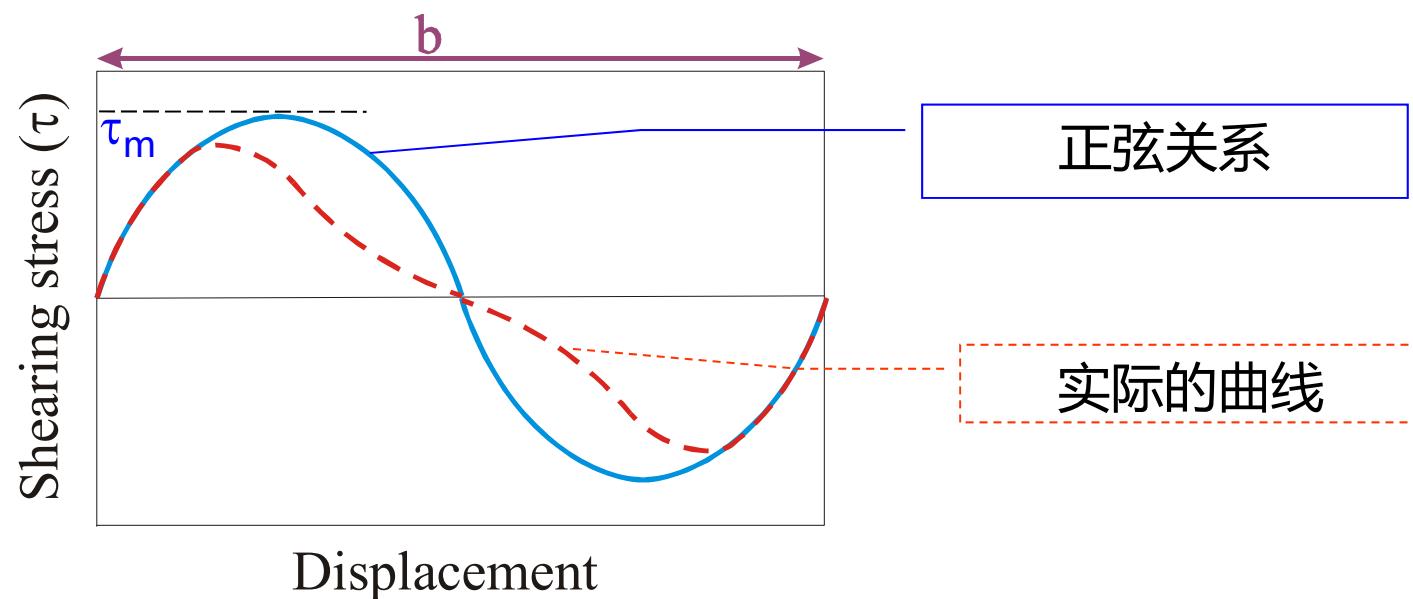
1.2 金属材料的微结构与变形机理



完美晶体的塑性变形



剪应力位
移曲线如
图所示



1.2 金属材料的微结构与变形机理



完美晶体的剪切强度

应力位移曲线近似方程

$$\tau = \tau_m \sin\left(\frac{2\pi x}{b}\right) \approx \tau_m \left(\frac{2\pi x}{b}\right)$$

胡克定律 (小变形)

$$\tau = G\gamma = G \frac{x}{a}$$

在具有最大切应力时发生滑动

$$\tau_m = \frac{G}{2\pi} \frac{b}{a}$$

如果 $b \sim a$

$$\tau_m \approx \frac{G}{2\pi}$$

材料	强度	
	理论 [MPa]	实验 [MPa]
Al	4200	0.7-0.8
Cu	7700	0.5-3
Fe	13000	25-30
Al_2O_3	20000	19000
金刚石	46000	21000

$$\tau_m \sim \frac{G}{2\pi}$$

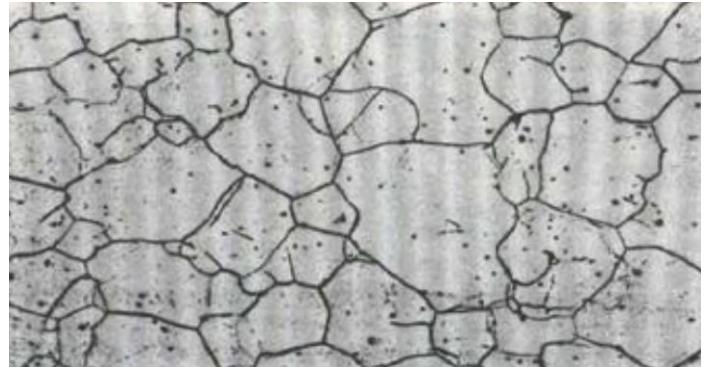
-
- 理论剪应力(τ_T)将在3-30 GPa范围内
 - 实际剪切应力(τ_E)范围: 0.5 – 10 MPa
 - $\tau_T > \tau_E \times 100!!!$

1.2 金属材料的微结构与变形机理

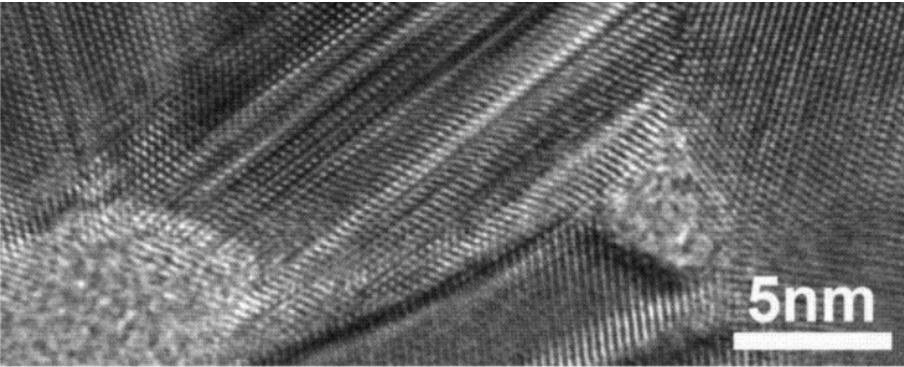


晶体缺陷

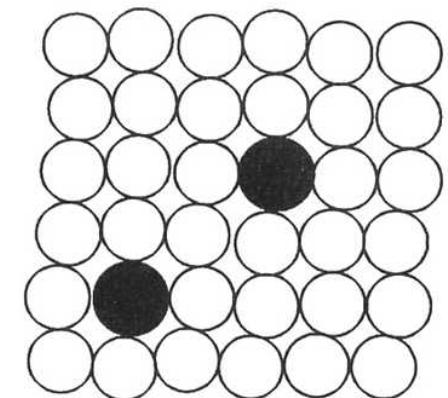
现实中，完美的晶体是不存在的，晶体内部或多或少都存在缺陷，分为点缺陷、线缺陷、面缺陷及体缺陷。



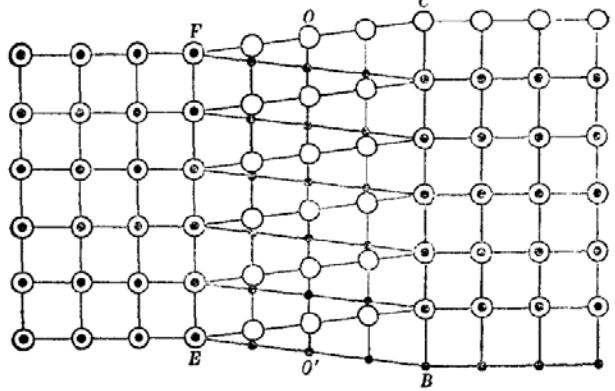
钢材中的常见缺陷



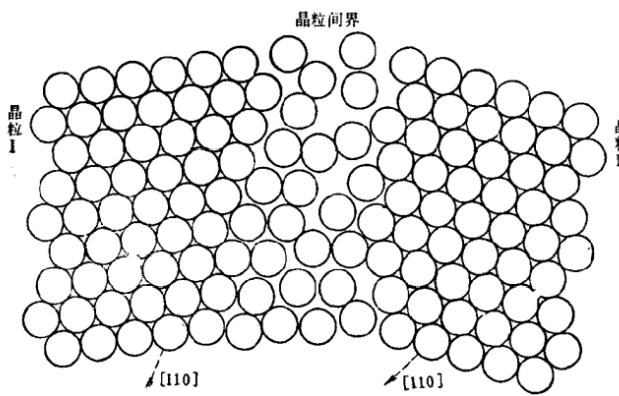
晶界



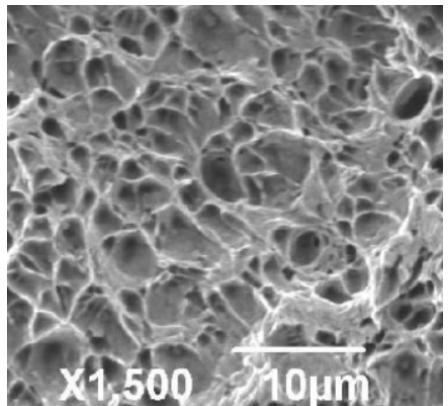
点缺陷



线缺陷

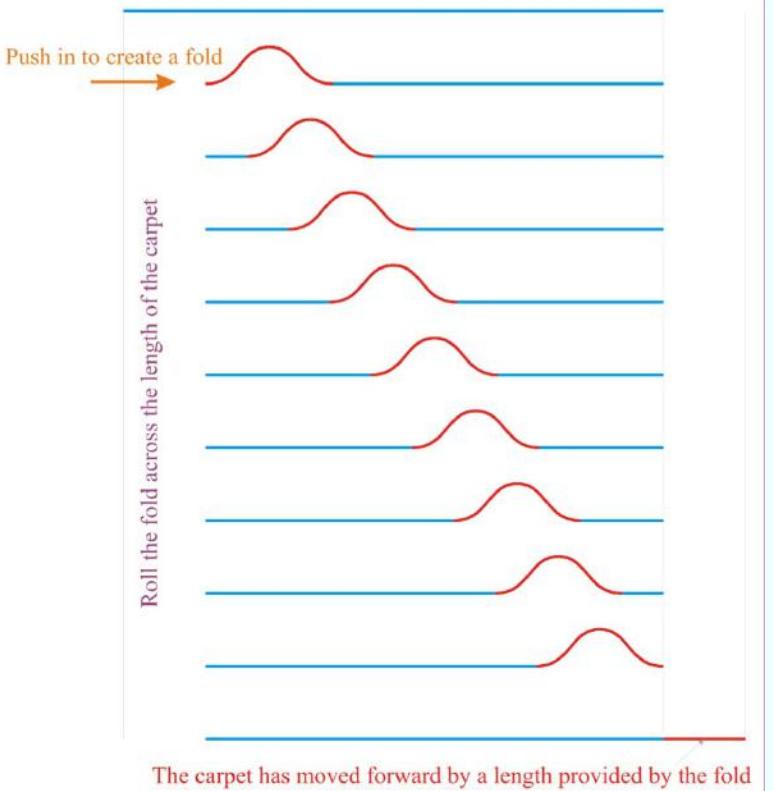
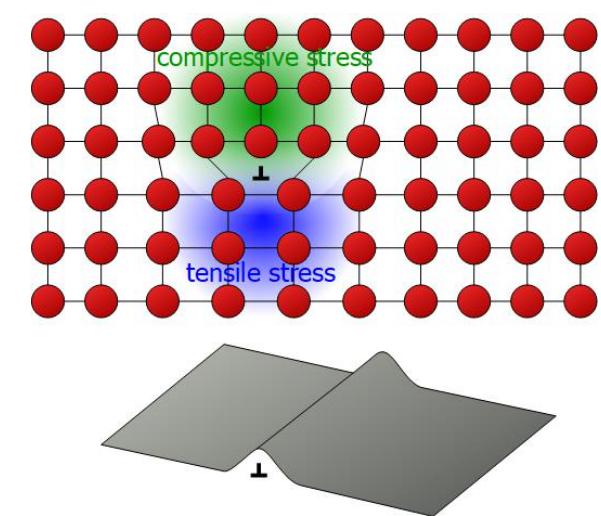


面缺陷



体缺陷

1.2 金属材料的微结构与变形机理

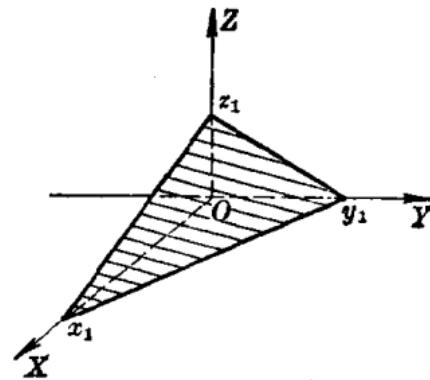


- 人们通常用“推地毯”来比喻错位在削弱晶体中的作用。
- 如果你想拉一整块地毯(又长又宽), 把它靠在地板上滑动, 所需要的力气是很大的。
- 然而, 如果地毯中产生了一个“凸起”, 并且这个凸起沿着地毯的长度方向移动, 那么当突起通过另一边时, 就会产生一小段位移。
- 与推动整个地毯所需的力相比, 通过移动凸起所需的力要小得多。

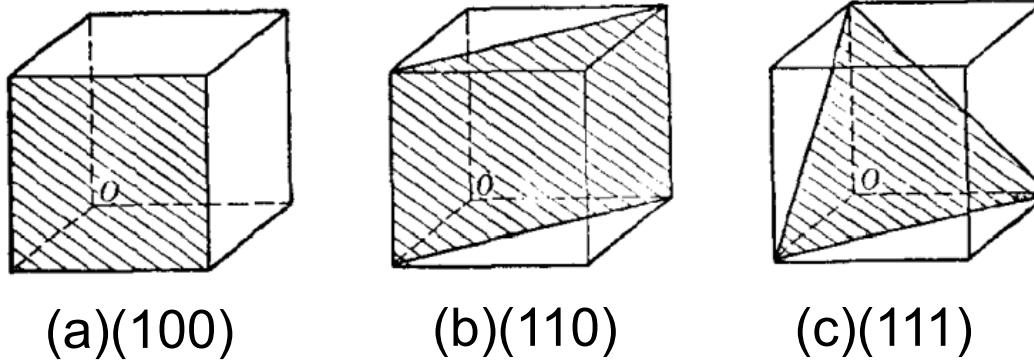
1.2 金属材料的微结构与变形机理



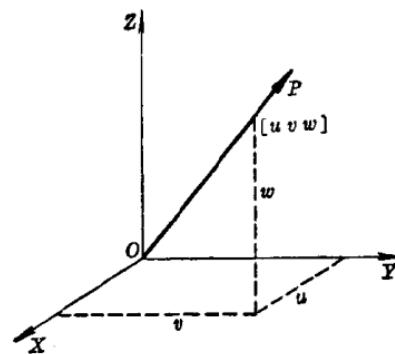
晶面和晶向



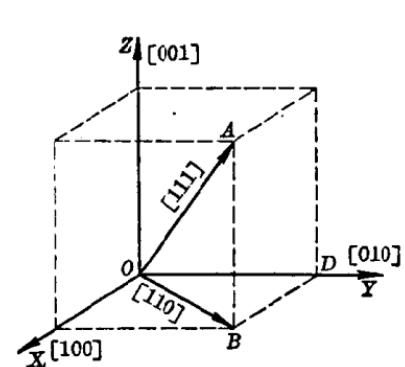
晶面指数标定



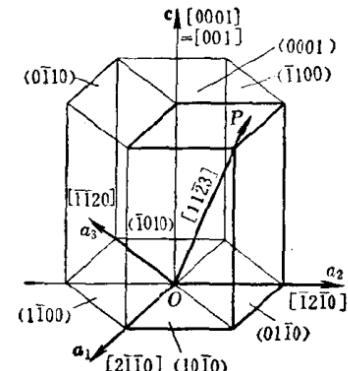
立方晶体重要晶面的晶面指数



晶向指数标定



立方晶体和六方晶体的晶向指数



1.2 金属材料的微结构与变形机理



金属晶体主要塑性变形机制

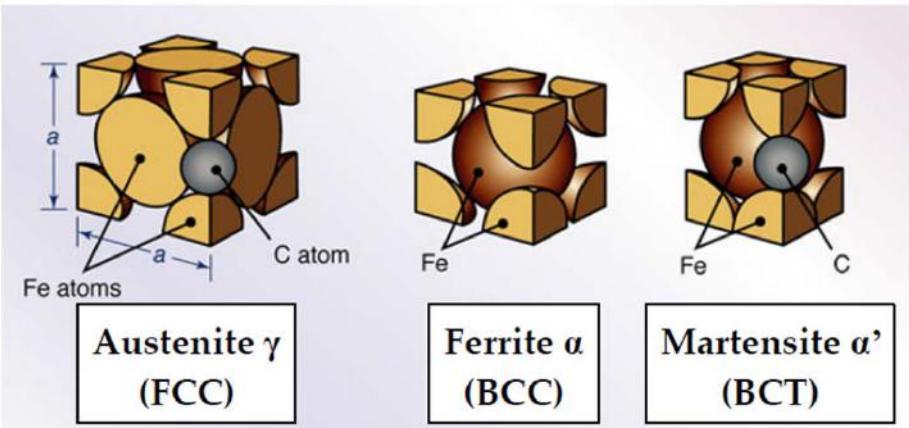
定义：外载作用下，晶体部分沿某一晶面和晶向发生平移。

滑移

FCC: $\{111\} <110>$

滑移系: BCC: $\{110\} \{112\} \{123\} <111>$

HCP: $\{10\bar{1}0\} \{10\bar{1}1\} \{0001\} <11\bar{2}0>$



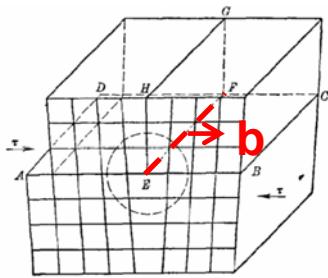
晶体结构	晶胞原子数	滑移系数量	常见金属
面心立方 (FCC)	4	12	Al、Cu、Ni、Au、 γ -Fe
体心立方 (BCC)	2	12~48	W、Mo、 α -Fe
密排六方 (HCP)	6	3或6	Mg、Zn、Ti、 ε -Fe

1.2 金属材料的微结构与变形机理

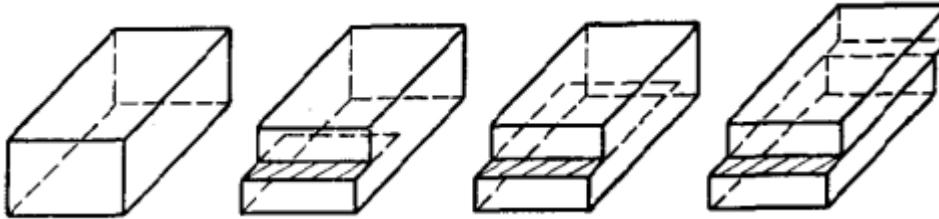


位错类型

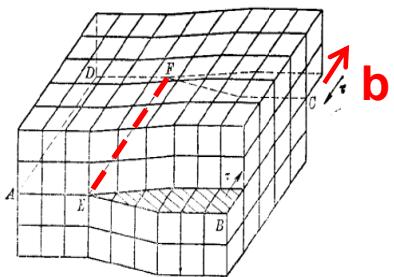
位错



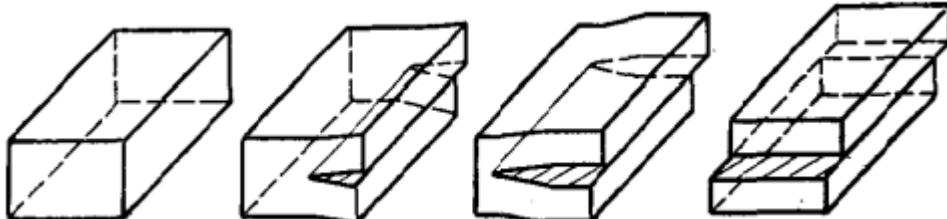
刃型位错



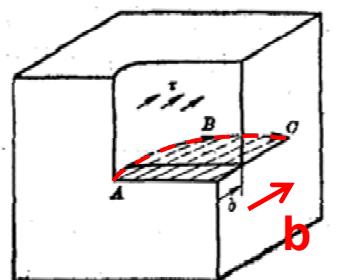
刃型位错演化



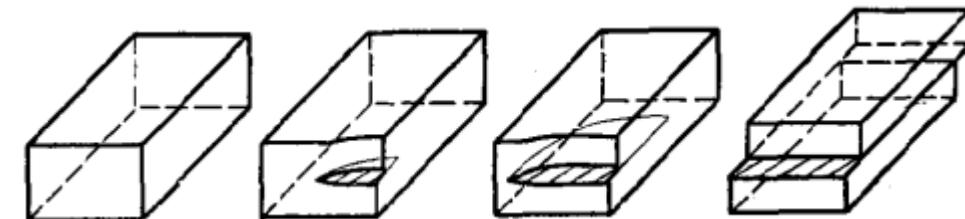
螺型位错



螺型位错演化



混合位错

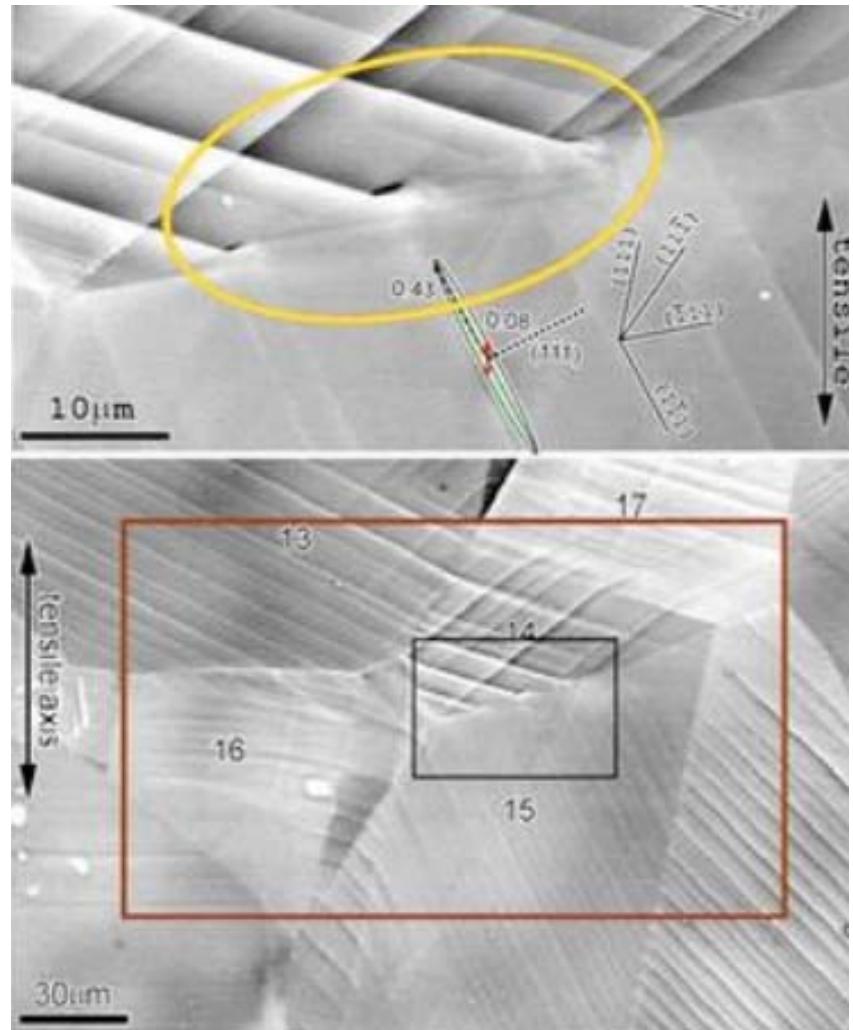


混合位错演化

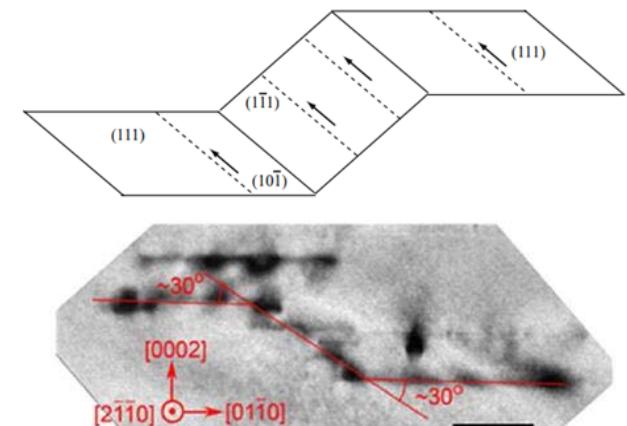
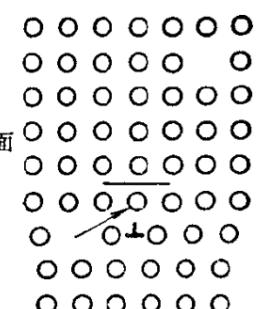
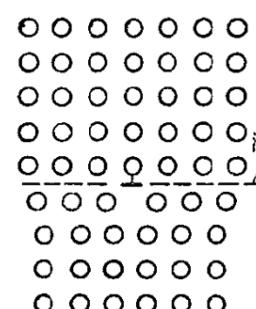
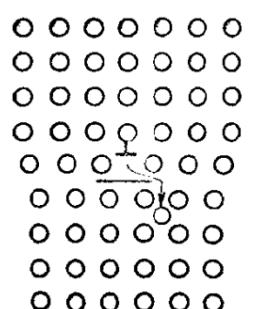
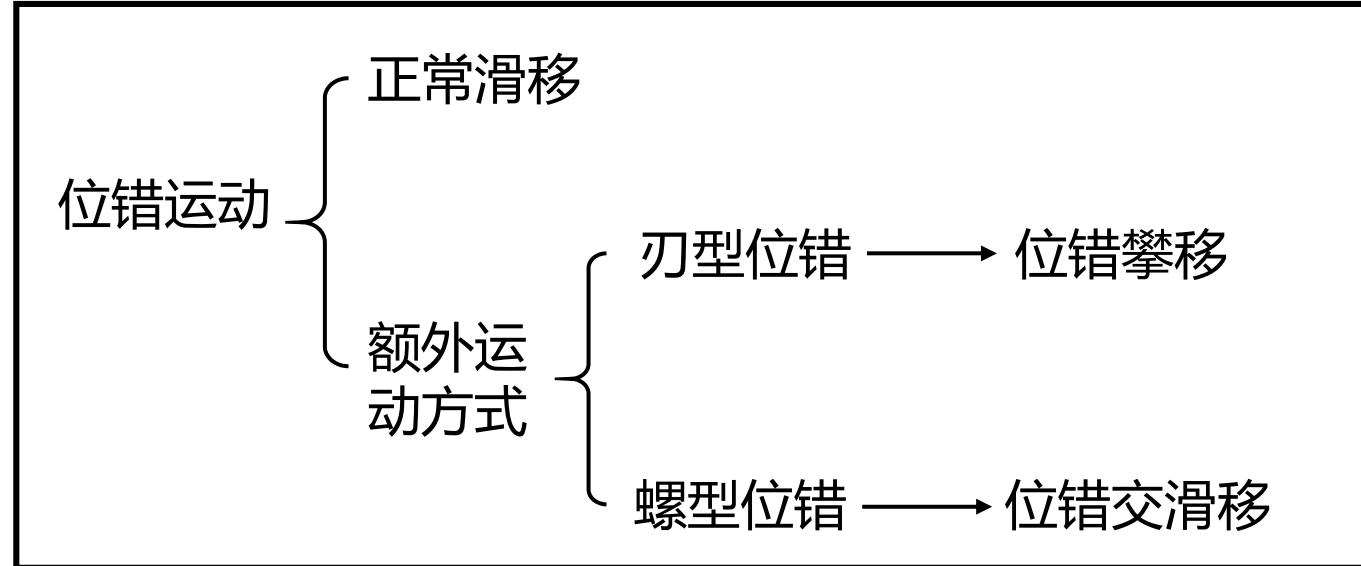
1.2 金属材料的微结构与变形机理



位错运动的方式



位错运动



位错攀移

位错交滑移

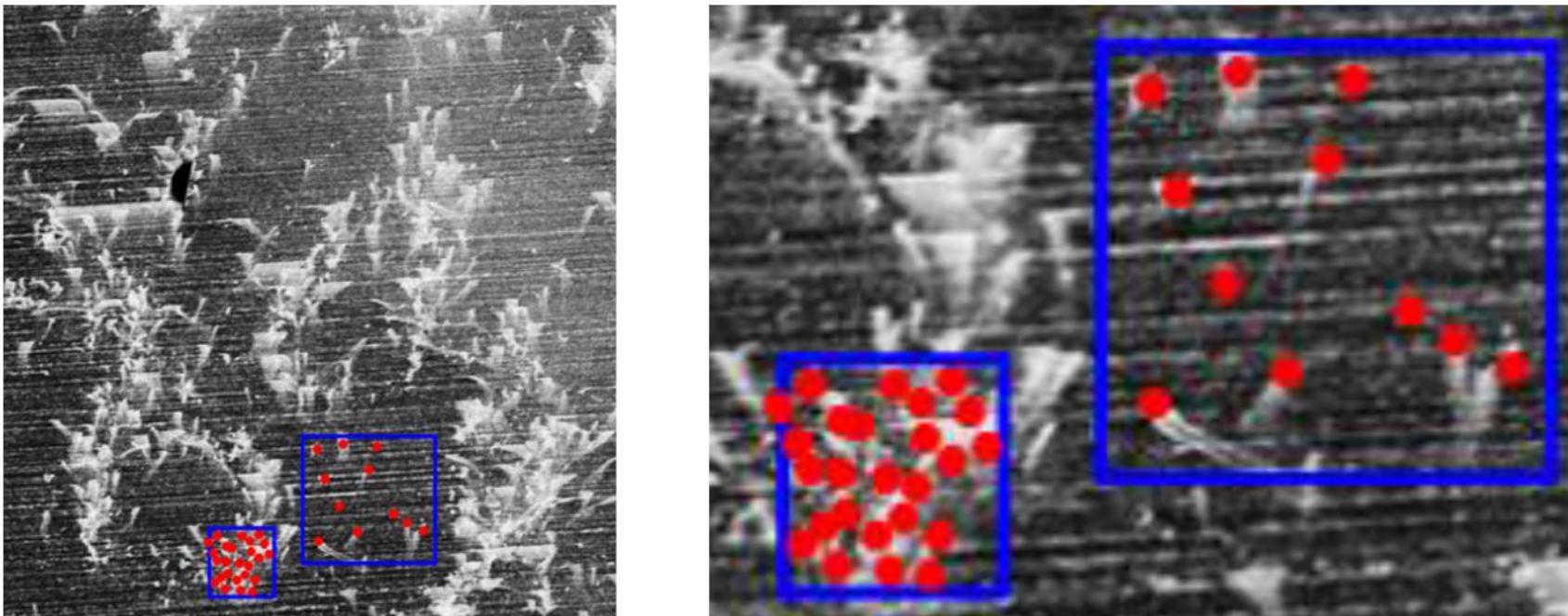
1.2 金属材料的微结构与变形机理

位错密度



体密度：单位体积内位错线的总长度 $\rho = l/V$ ，单位是1/平方米。

面密度：穿过单位截面积的位错线数目 $\rho = N/S$ ，单位也是1/平方米。



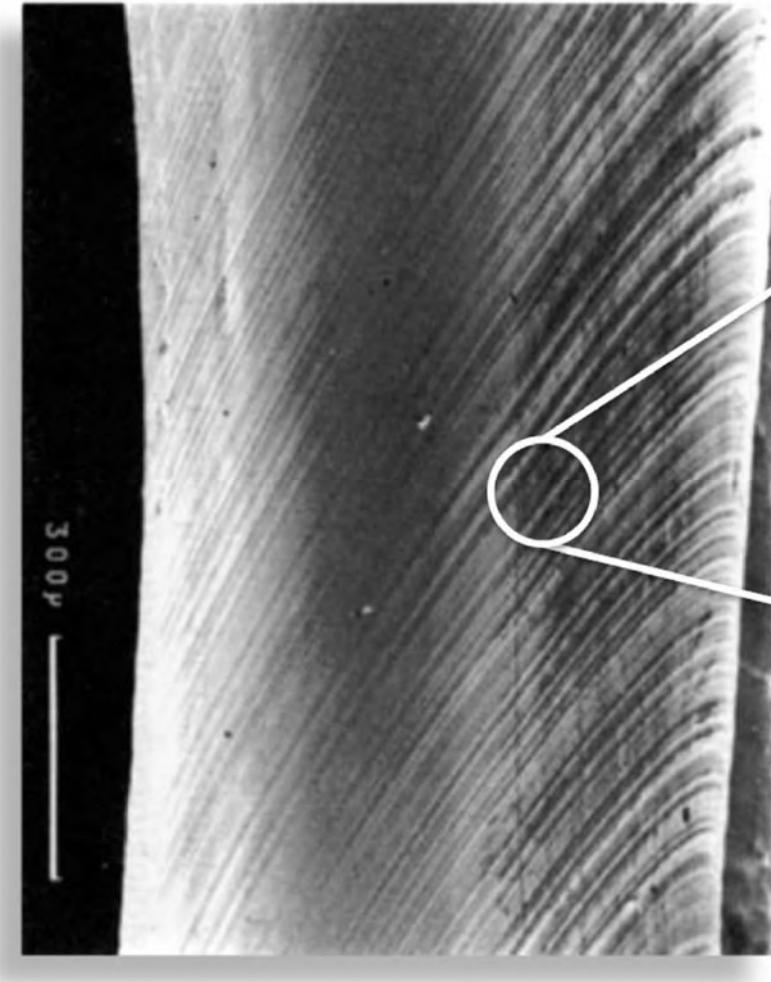
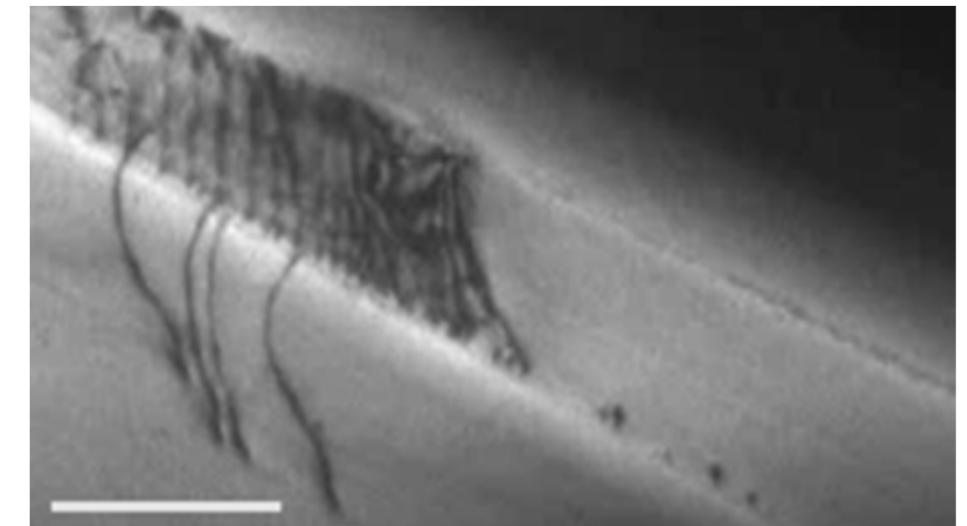
在%0.2的剪切应变幅循环100圈的位错微结构的ECCI图

一般退火金属晶体中 ρ 为 $10^9 \sim 10^{10} \text{m}^{-2}$ 数量级，经剧烈冷加工的金属晶体中， ρ 为 $10^{14} \sim 10^{16} \text{m}^{-2}$

1.2 金属材料的微结构与变形机理



Orowan公式 $\dot{\gamma} = \rho_m b v$



$$\dot{\gamma} = \frac{d\gamma}{dt} = n \frac{dx}{X Z} \frac{b}{dt} \frac{1}{Z} = \rho_m b v$$

X: 位错运动方向
Y: 位错线方向
Z: 滑移面法线方向

1.2 金属材料的微结构与变形机理

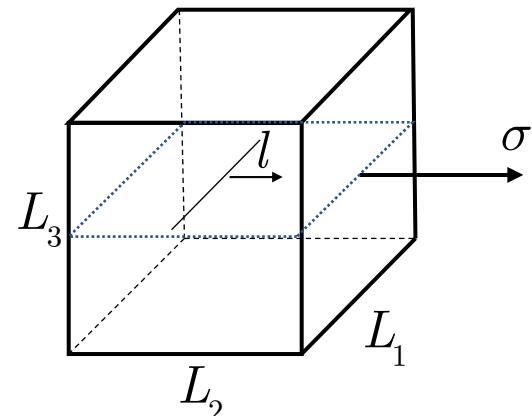


Orowan公式 $\dot{\gamma} = \rho_m b v$

设在 $L_1 \times L_2 \times L_3$ 的晶体中，滑移面为 $L_1 \times L_2$ ，位错线全长为 ξ 。在外力作用下，位错平均滑移距离为 l 。其滑移区的总面积便为 $l\xi$ ，故此时沿滑移面产生的位移就为 $l\xi b / L_1 L_2$ 。

此时 γ 切应变便可写为

$$\gamma = \frac{\xi l}{L_1 L_2} \frac{b}{L_3} = \frac{l \xi b}{L_1 L_2 L_3} = \frac{\xi}{V} l b = \rho_v l b$$



位错滑移示意图

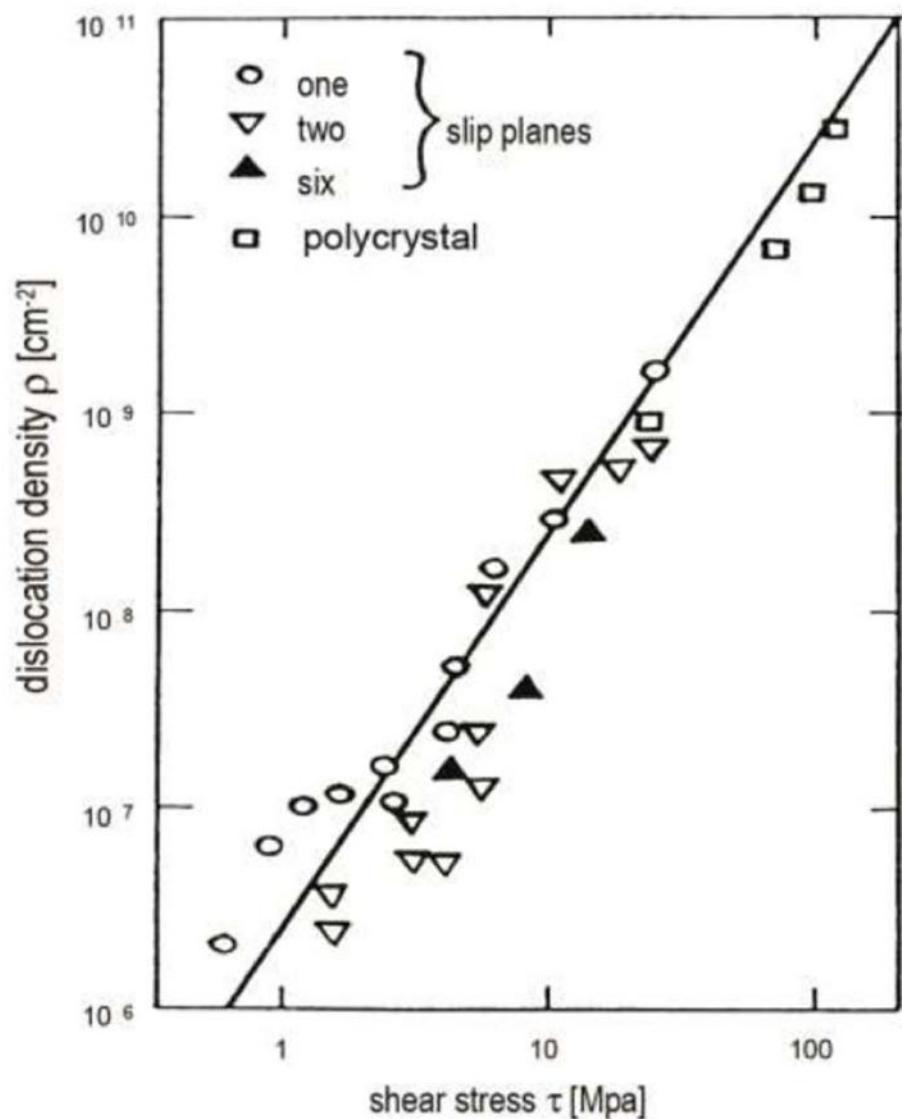
其中 V 为晶体的体积， ρ_v 为位错的体密度。对其求导，便可得到剪切应变率，即 Orowan公式：

$$\dot{\gamma} = \rho_v v b$$

1.2 金属材料的微结构与变形机理



Taylor硬化公式

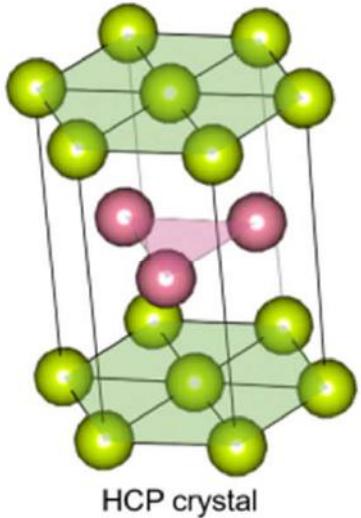


$$\tau = aGb\sqrt{\rho}$$

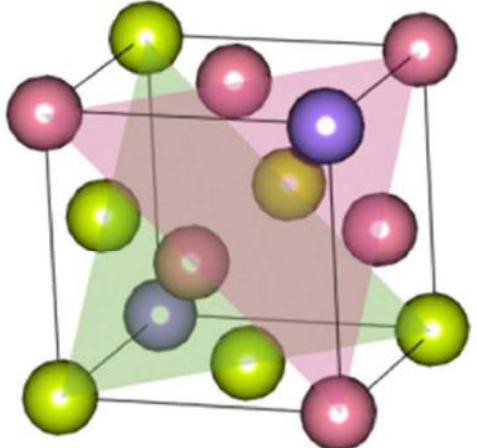
1.2 金属材料的微结构与变形机理



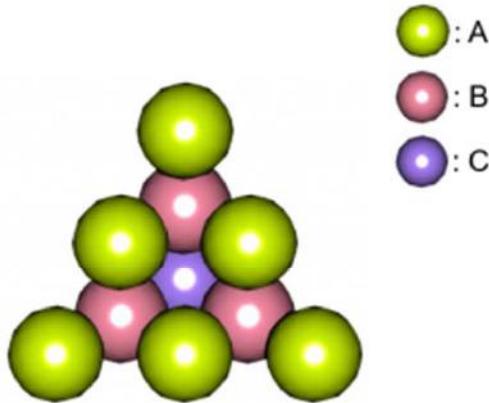
堆垛层错



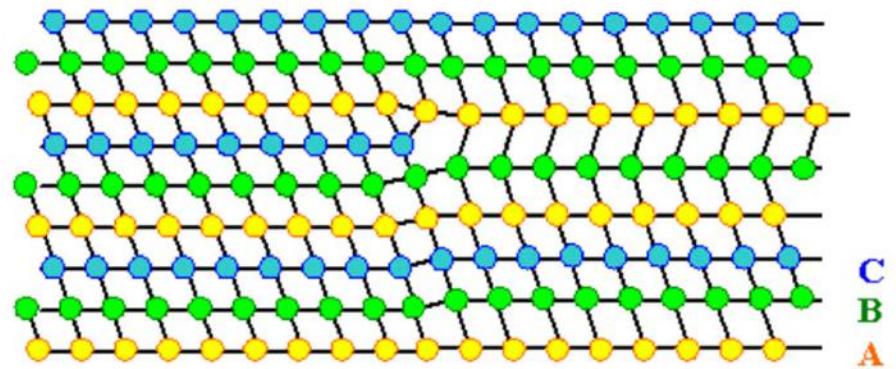
HCP crystal



(111) plane of FCC crystal

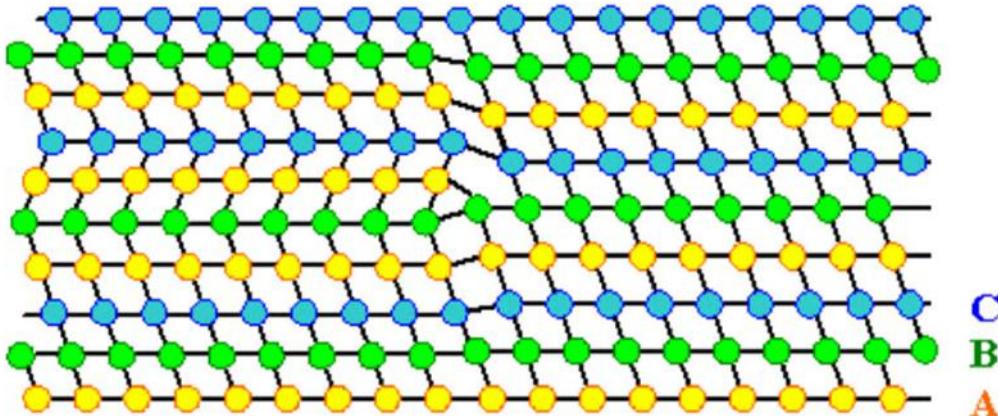


Plane view of close-packed planes



C
B
A

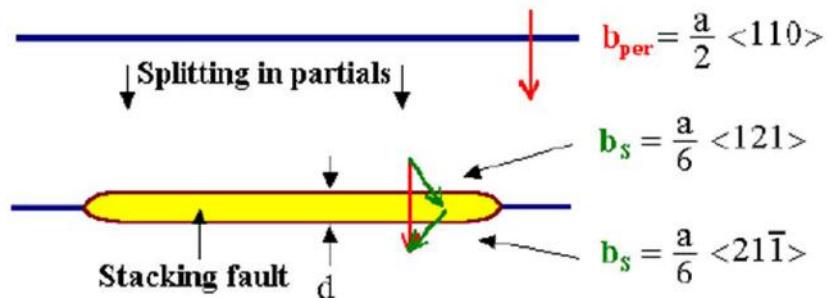
内禀层错



C
B
A

外禀层错

1.2 金属材料的微结构与变形机理

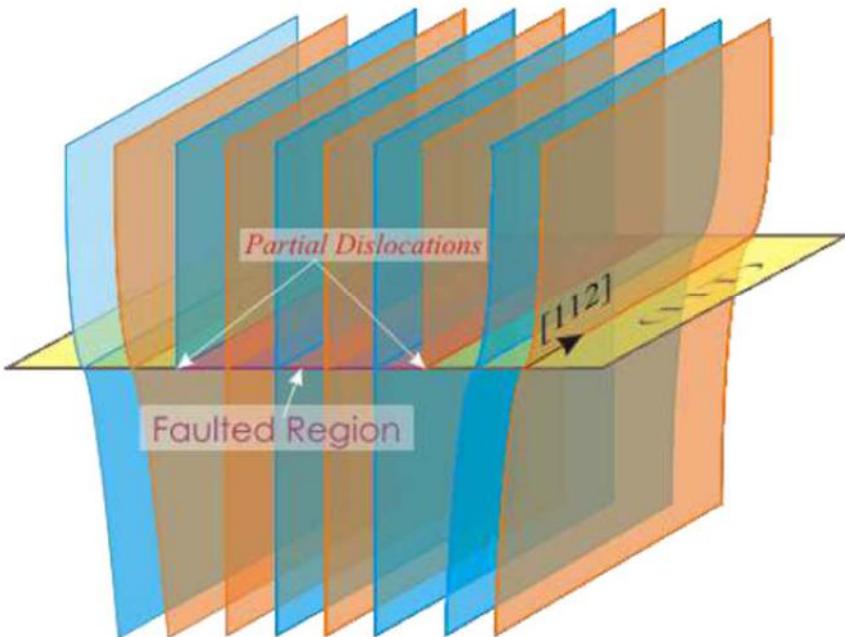
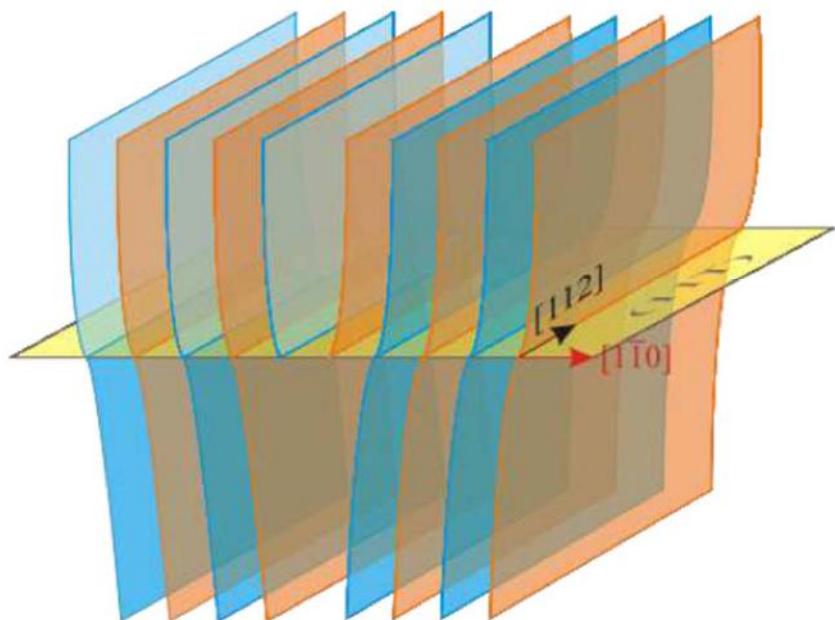


Energy of the perfect dislocation

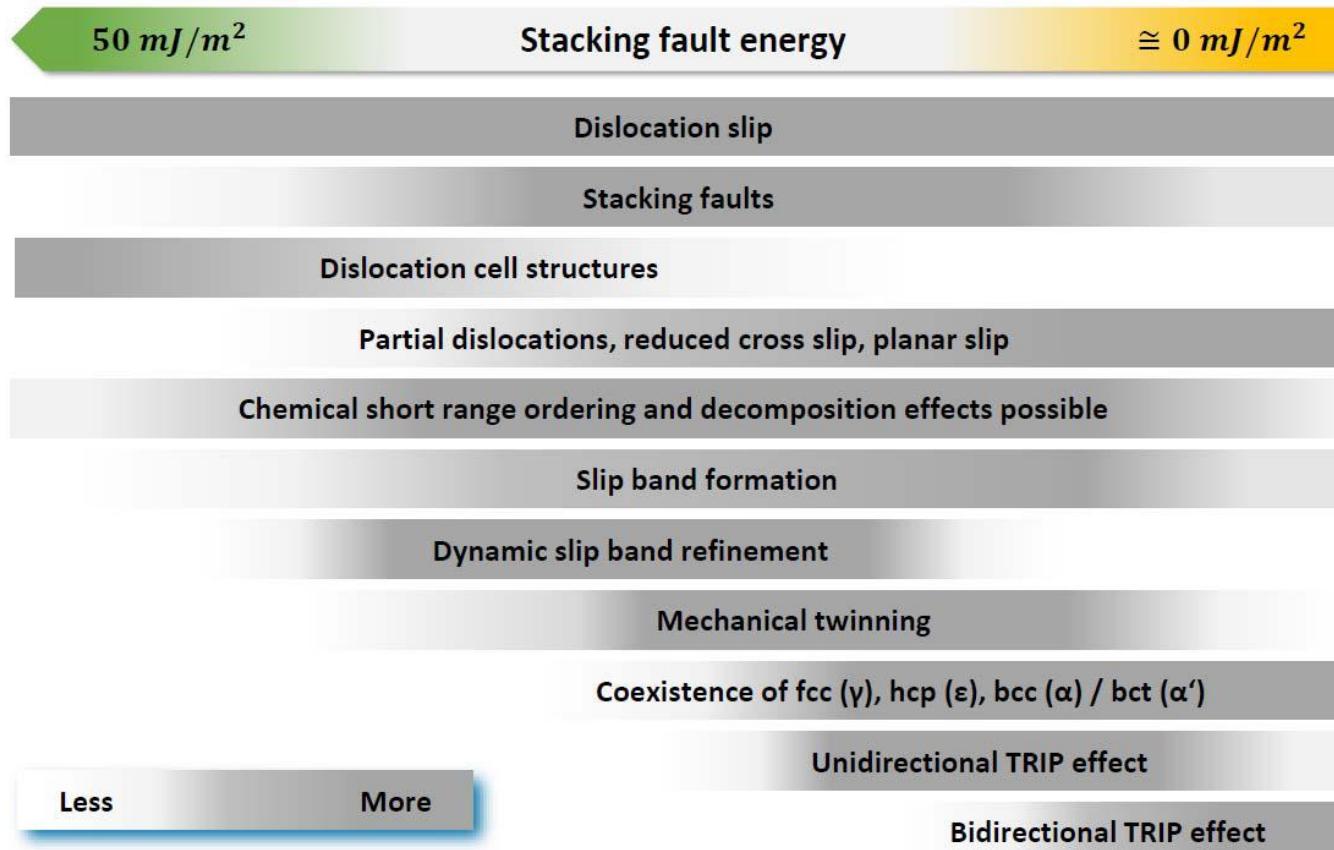
$$= G \cdot b^2 = G \cdot (a/2<110>)^2 = \frac{G \cdot a^2}{2}$$

Energy of the two partial dislocations

$$= 2G \cdot (a/6<112>)^2 = 2G \cdot a^2/36 \cdot (1^2 + 1^2 + 2^2) = \frac{G \cdot a^2}{3}$$



1.2 金属材料的微结构与变形机理



层错能	低层错能 (低于20 mJ/m^2)	中等层错能 (20-40 mJ/m^2)	高层错能 (大于45 mJ/m^2)
主导方式	相变	孪生	位错滑移

1.2 金属材料的微结构与变形机理



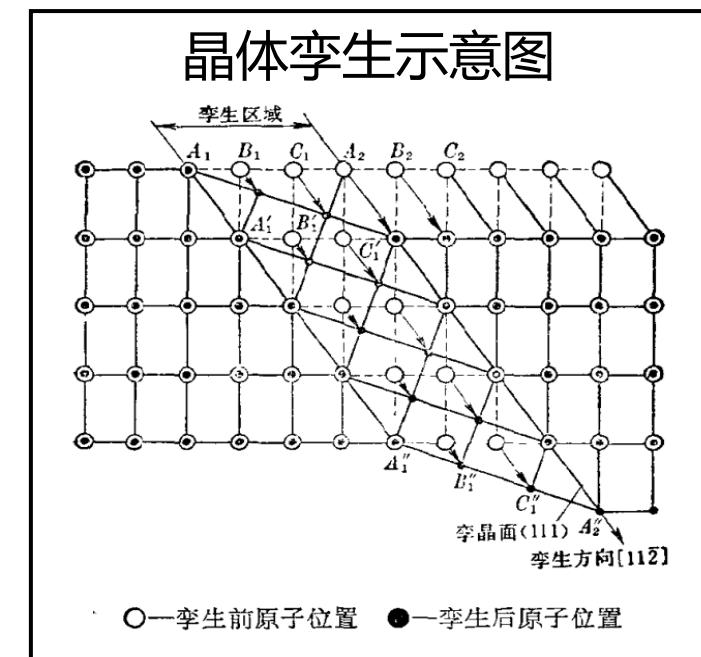
金属晶体主要塑性变形机制

定义：外载作用下，晶体沿某一晶面和晶向发生切变，切变后晶体沿切变面呈镜面对称。

孪生

FCC } 低温，高应变速率条件下发生孪生
BCC }

HCP 晶格对称性差，滑移系少，塑性变形常以孪生方式进行



晶体结构	孪生面	孪生方向
面心立方 (FCC)	{111}	<11-2>
体心立方 (BCC)	{112}	<111>
密排六方 (HCP)	{10-12}	<-1011>

1.2 金属材料的微结构与变形机理



金属晶体主要塑性变形机制

	滑移	孪生
相同点	1. 都是切变； 2. 沿一定的晶向和晶面进行； 3. 不改变晶体结构	
晶体位向	不改变	改变，形成镜面对称关系
位移量	滑移方向上原子间距的整数倍，较大	小于孪生方向上的原子间距，较小
对塑性变形的贡献	很大，总变形量大	有限，总变形量小
变形应力	有一定的临界分切应力	所需的临界分切应力远高于滑移
变形条件	一般先发生滑移	滑移困难时发生
变形机制	全位错运动的结果	分位错运动的结果

1.2 金属材料的微结构与变形机理



孪生和相变的微观机理

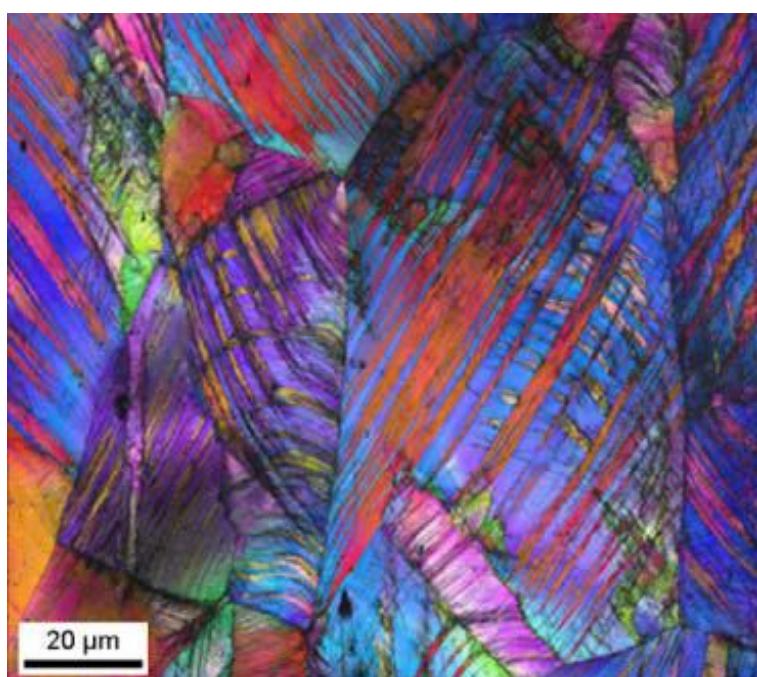
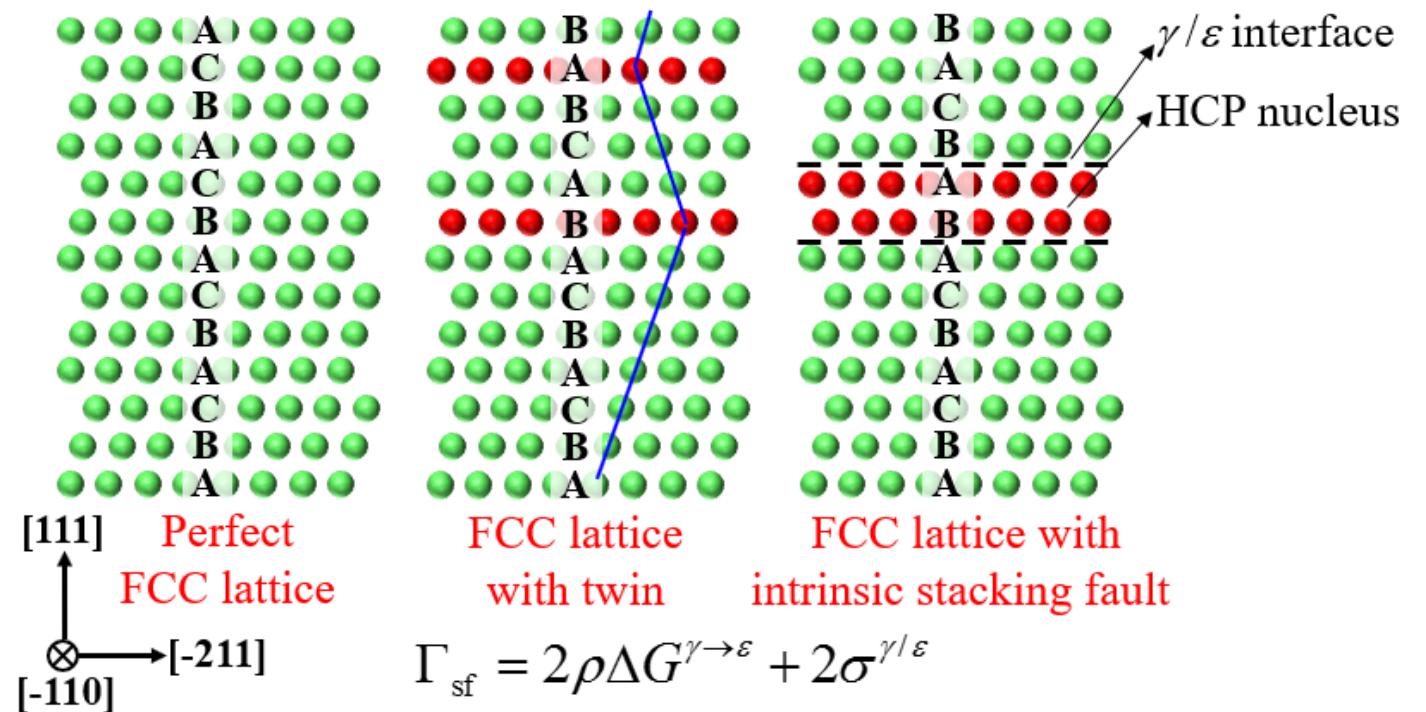
在FCC材料中，孪生和相变基于相同的位错反应： $\frac{a}{2}\langle 01\bar{1} \rangle + \frac{a}{2}\langle \bar{1}01 \rangle = 3 \times \frac{a}{6}\langle 11\bar{2} \rangle$

孪晶：晶体两部分沿一公共面构成镜面对称的位向关系，公共面称为孪晶面。

相变：化学组成不变，在外部因素影响下，晶体结构或宏观性质发生变化的现象。



Adolf Martens
(1850–1914)



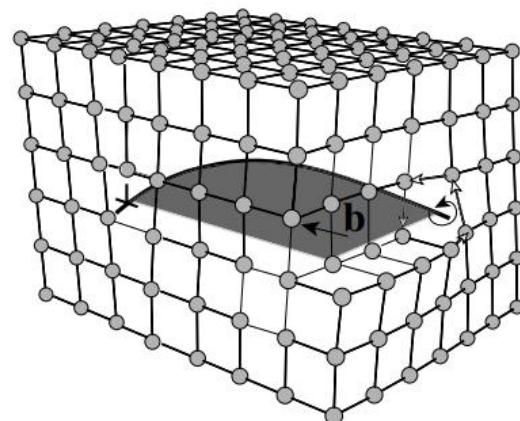
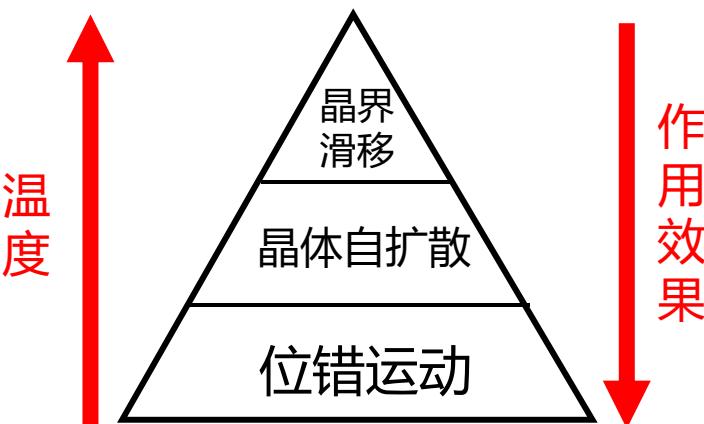
1.2 金属材料的微结构与变形机理



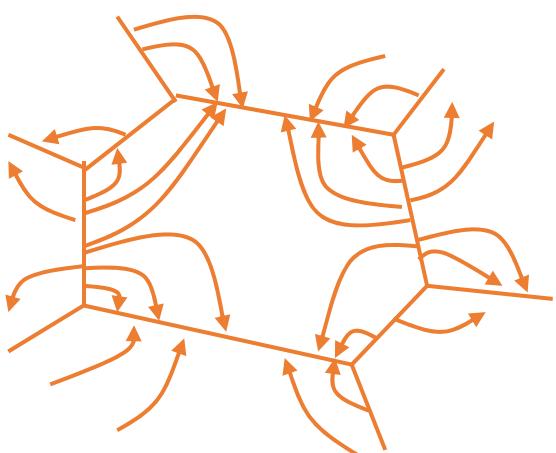
蠕变

蠕变的变形机制主要有①位错滑移/攀移 ②晶体自扩散 ③晶界蠕变

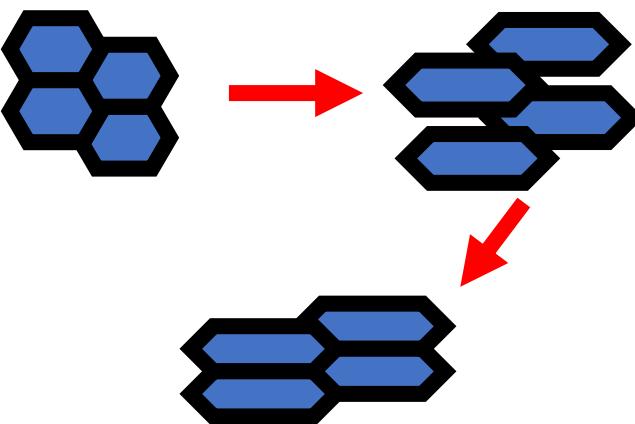
位错滑移仍是蠕变的主要机制，当温度升高时，晶体自扩散以及晶界滑移才逐渐出现并发挥作用。



位错滑移



原子迁移示意图



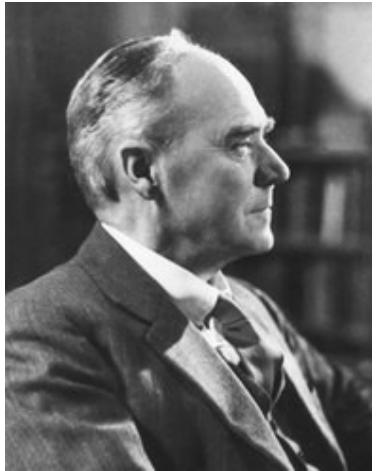
晶界蠕变示意图

- 1. 金属力学性质的微观理论**
- 2. 晶体塑性本构理论**
 - 2.1 变形几何学与运动学**
 - 2.2 经典唯象的模型**
 - 2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型**
 - 2.4 应变梯度晶体塑性**
- 3. 晶体塑性理论的有限元实现**
- 4. 应用案例**

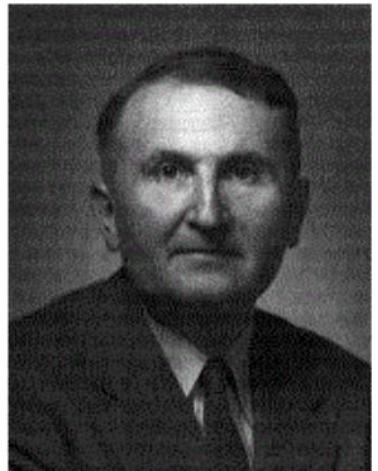
2.1 变形几何学与运动学



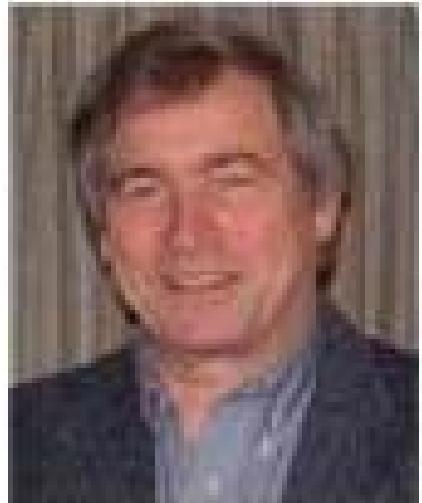
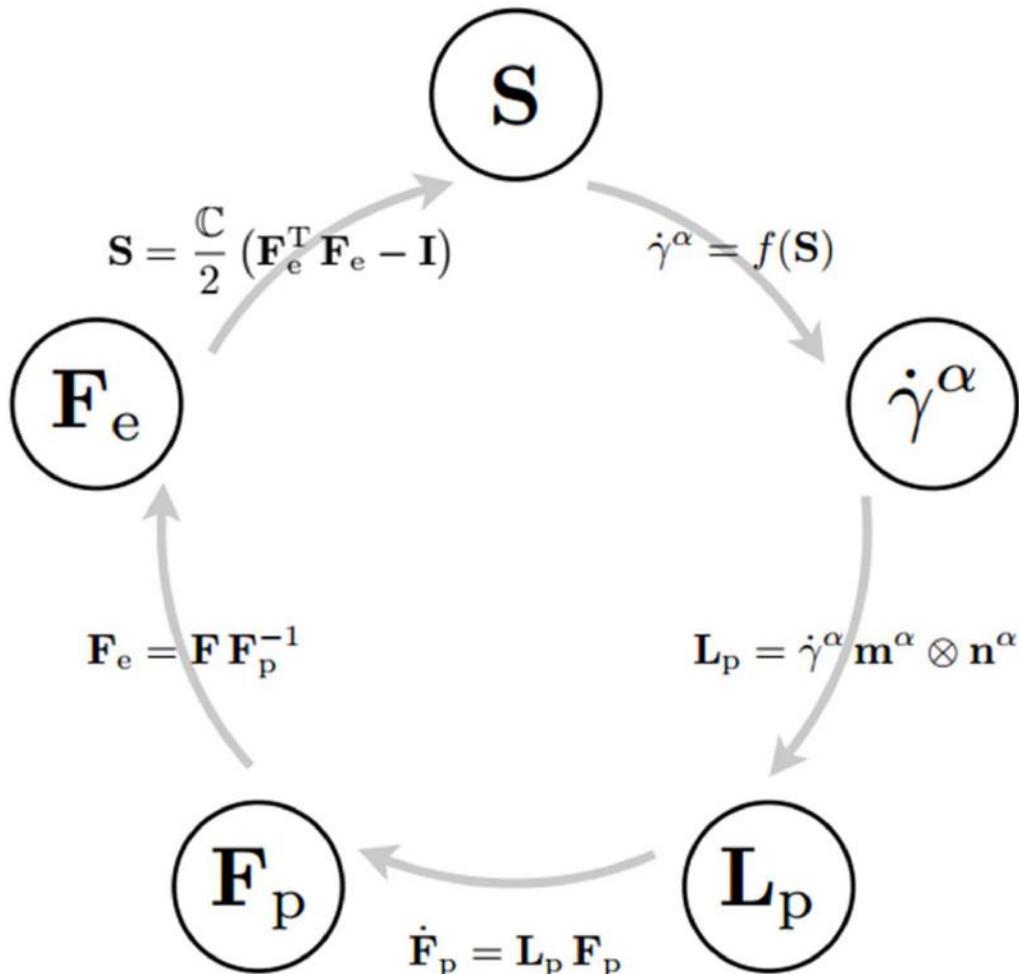
晶体塑性本构理论框架



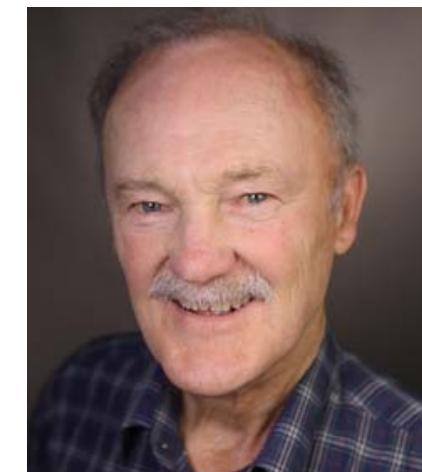
G.I. Taylor



E. Orowan



J.R. Rice



J.W. Hutchinson

2.1 变形几何学与运动学



连续介质力学框架

总变形梯度 \mathbf{F} 分解成弹性部分 \mathbf{F}_e 和塑性部分 \mathbf{F}_p 。

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} \cdot \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{F}_p$$

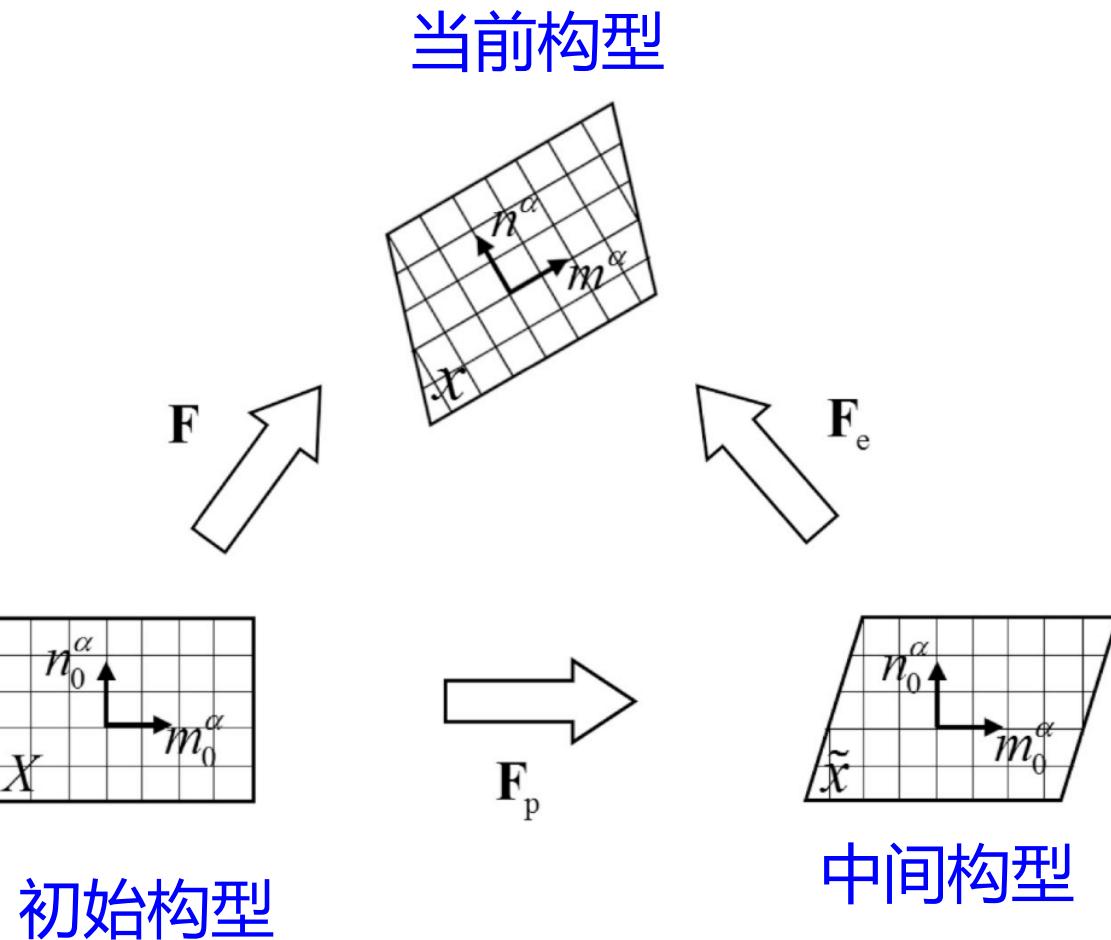
\mathbf{F}_e : 弹性变形、刚体转动

\mathbf{F}_p : 位错滑移、孪生、相变等引起的塑性变形

滑移面切向和法向的更新

$$\mathbf{m}^\alpha = \mathbf{F}_e \cdot \mathbf{m}_0^\alpha = \mathbf{m}_0^\alpha \cdot \mathbf{F}_e^T$$

$$\mathbf{n}^\alpha = \mathbf{n}_0^\alpha \cdot \mathbf{F}_e^{-1} = \mathbf{F}_e^{-T} \cdot \mathbf{n}_0^\alpha$$



晶格畸变前后滑移面的滑移方向和法线方向满足正交原则

$$\mathbf{m}^\alpha \cdot \mathbf{n}^\alpha = (\mathbf{m}_0^\alpha \cdot \mathbf{F}_e^T) \cdot (\mathbf{F}_e^{-T} \cdot \mathbf{n}_0^\alpha) = \mathbf{m}_0^\alpha \cdot (\mathbf{F}_e^T \cdot \mathbf{F}_e^{-T}) \cdot \mathbf{n}_0^\alpha = \mathbf{m}_0^\alpha \cdot \mathbf{n}_0^\alpha$$

2.1 变形几何学与运动学

连续介质力学框架

中间构型下的广义胡克定律

$$\mathbf{S} = \det(\mathbf{F}_e) \mathbf{F}_e^{-1} \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{F}_e^{-T} = \mathbb{C} : \mathbf{E}_e$$

$$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_e^T \cdot \mathbf{F}_e - \mathbf{I})$$

变形梯度的演化

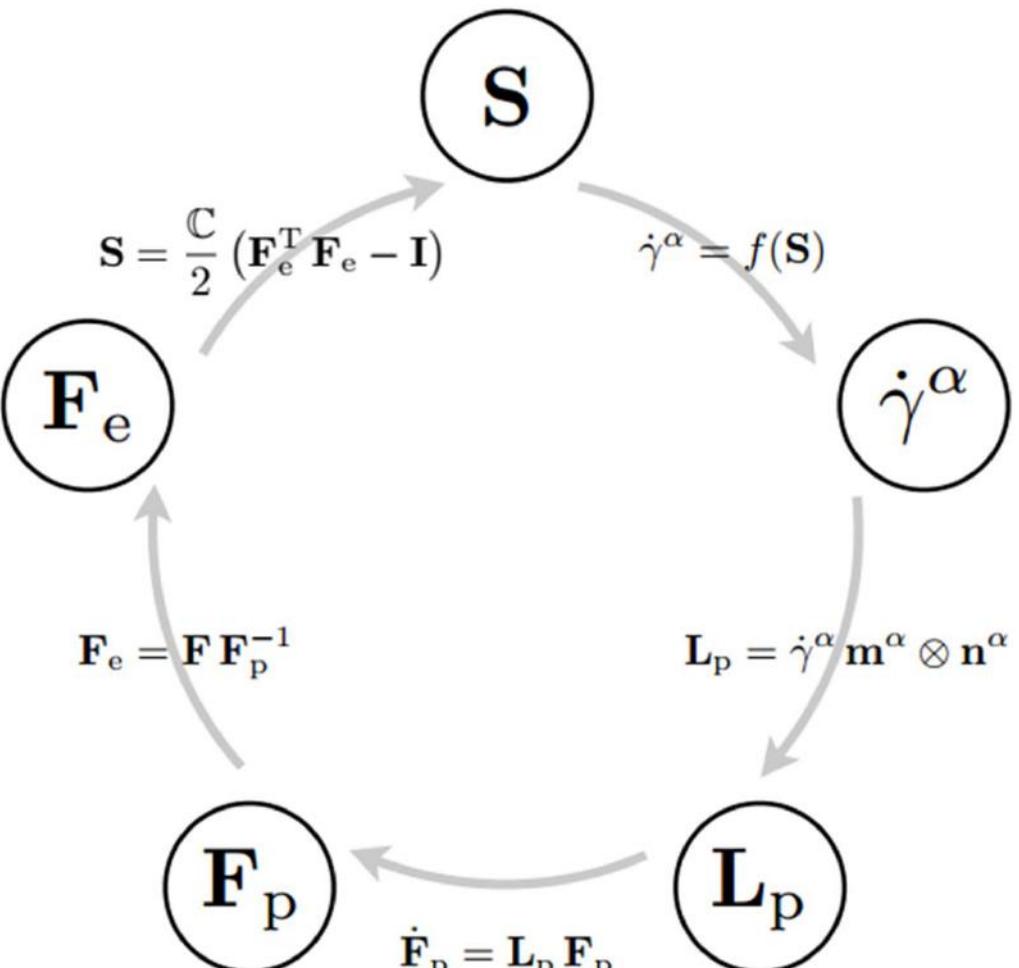
$$\mathbf{F}_e = \mathbf{F} \cdot \mathbf{F}_p^{-1}$$

$$\dot{\mathbf{F}}_p = \mathbf{L}_p \cdot \mathbf{F}_p$$

塑性变形

$$\mathbf{L}_p = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}_0^\alpha \otimes \mathbf{n}_0^\alpha$$

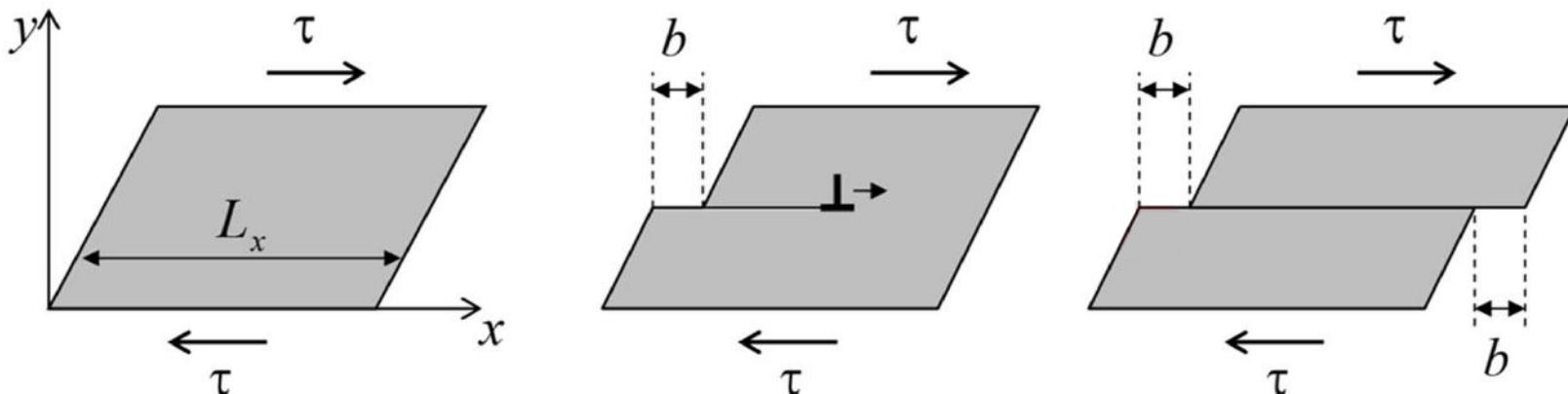
$$\dot{\gamma}^\alpha = f(\mathbf{S})$$



2.1 变形几何学与运动学



连续介质力学框架



$$d\tilde{\mathbf{x}} = d\mathbf{X} + \gamma(d\mathbf{X} \cdot \mathbf{n})\mathbf{m} = d\mathbf{X} + \gamma(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}) \cdot d\mathbf{X}$$

$$\mathbf{F}_p = \frac{\partial \tilde{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{X}} = \mathbf{I} + \gamma(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n})$$

$$\mathbf{F}_p^{-1} = \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}} = \mathbf{I} - \gamma(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n})$$

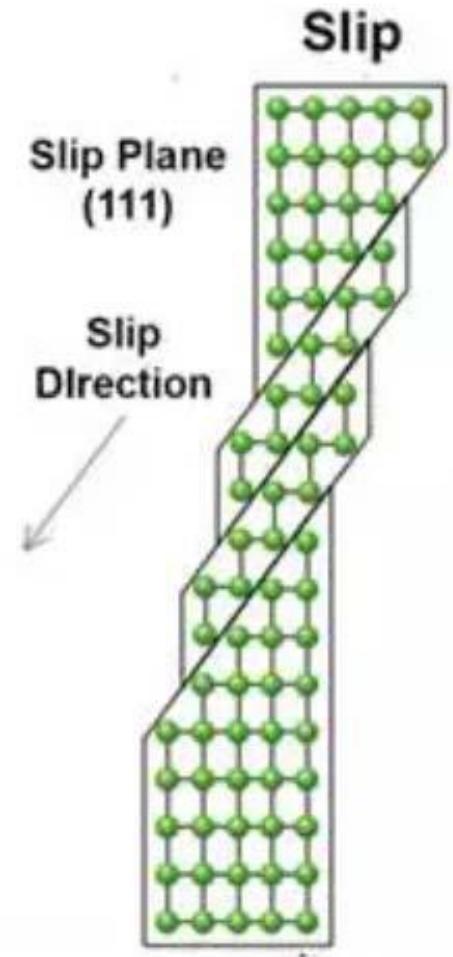
$$\tilde{\mathbf{L}}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \cdot \mathbf{F}_p^{-1} = \dot{\gamma}(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}) \cdot [\mathbf{I} - \gamma(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n})]$$

$$= \dot{\gamma}(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}) - \dot{\gamma}\gamma(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}) \cdot (\mathbf{m} \otimes \mathbf{n}) = \dot{\gamma}(\mathbf{m} \otimes \mathbf{n})$$

2.2 经典唯象的模型



滑移的幂律本构方程



滑移系剪切应变率的计算

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{\alpha}}{s^{\alpha}} \right|^n \operatorname{sign}(\tau^{\alpha})$$

$\dot{\gamma}^{\alpha}$ ---- 滑移的剪切应变率

$\dot{\gamma}_0$ ---- 参考剪切应变率

τ^{α} ---- 滑移面上沿滑移方向
的分切应力 $\tau^{\alpha} = \mathbf{S} : (\mathbf{m}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_0^{\alpha})$

s^{α} ---- 滑移系的滑移阻力

n ---- 率敏感指数

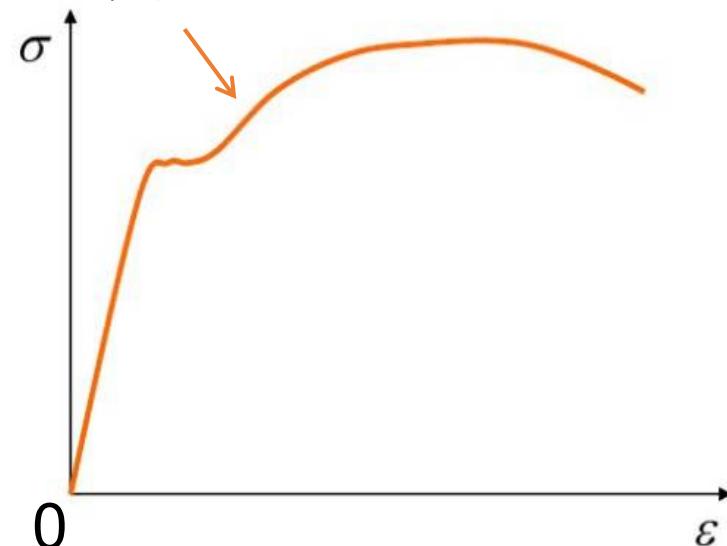
硬化模型

$$\dot{s}^{\alpha} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{\beta}$$

$h_{\alpha\alpha}$ ---- 自硬化模量

$h_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) ---- 潜硬化模量

硬化



2.2 经典唯象的模型



P. A. N.硬化模型

D. Peirce等 (1982) 用一相对简单形式来描述自硬化模量:

$$h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad \rightarrow \quad \tau(\gamma) = \tau_0 + (\tau_s - \tau_0) \tanh \left(\frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right)$$

h_0 ----初始硬化模量

τ_0 ----与临界分切应力初始值相同的屈服应力

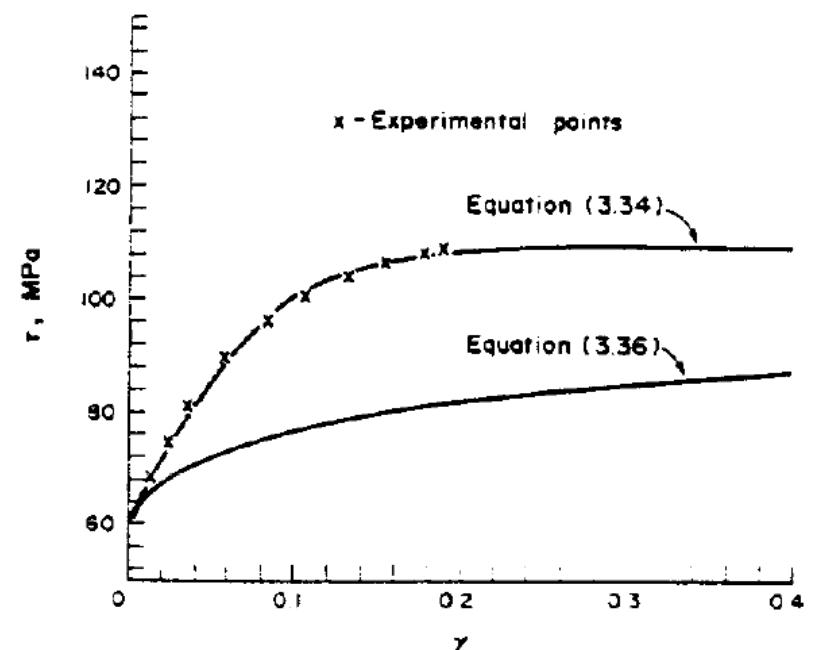
τ_s ----为大塑性流动发生时的临界应力

γ ----所有滑移系的累积剪切应变, $\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt$

$\tau(\gamma)$ ----单滑移时滑移面上的分切应力

潜在硬化模量这样给定: $h_{\alpha\beta} = qh(\gamma)$

q ---- 常数



单滑移时分切应力和切应变的函数关系

2.2 经典唯象的模型



Bassani-Wu硬化模型

该模型认为滑移系的交互作用将会大大提高各个滑移自身硬化系数

$$\left. \begin{array}{l} h_{\alpha\alpha} = F(\gamma^\alpha) \cdot G(\gamma^\beta, \beta = 1, \dots, N) \\ h_{\alpha\beta} = qh_{aa}, \beta \neq \alpha \end{array} \right\} \quad \begin{aligned} F(\gamma^\alpha) &= (h_0 - h_s) \operatorname{sech}^2 \left[\frac{(h_0 - h_s) \gamma^\alpha}{\tau_s - \tau_0} \right] + h_s \\ G(\gamma^\beta, \beta = 1, \dots, N) &= 1 + \sum_{\beta \neq \alpha} f_{\alpha\beta} \tanh \left(\gamma^\beta / \gamma_0 \right) \end{aligned}$$

h_s ----位错易滑移的硬化阶段 I 过程
中的硬化模量

G ----交互硬化函数

γ_0 ----滑移系间相互作用达到峰值强
度后的滑移量

$f_{\alpha\beta}$ ----特定滑移间作用的强度值

Bassani-Wu硬化模型

对于面心立方晶体，Bassani-Wu指出，存在五类不同的交互作用，系数 $f_{\alpha\beta}$ 可用五个常数 a_i 来表示，

- a_1 ——表征两个滑移系的滑移方向相同，而滑移面不同
- a_2 ——滑移系 α 和 β ，合成的Burgers矢量，能量不许可（Hirth自锁）
- a_3 ——共面交截，滑移系 α 和 β 有相同的滑移面，不同的滑移方向
- a_4 ——横滑交截，滑移系 α 的滑移方向位于 β 滑移系的滑移面上，合成的Burgers矢量是能量许可的
- a_5 ——非关联交截，合成的Burgers矢量是能量许可的，但并不位于两个滑移系的滑移面上

一般来说， $a_1 < a_2 < a_3 < a_4 < a_5$

2.2 经典唯象的模型



滑移和孪生的幂律本构方程

孪生作为重要的塑性变形机制，只考虑滑移的塑性变形是不客观的。Kalidindi (1998) 发展了一种包含了孪生机制的晶体塑性模型，在唯象的本构基础上考虑**孪生和滑移的协同效应**。

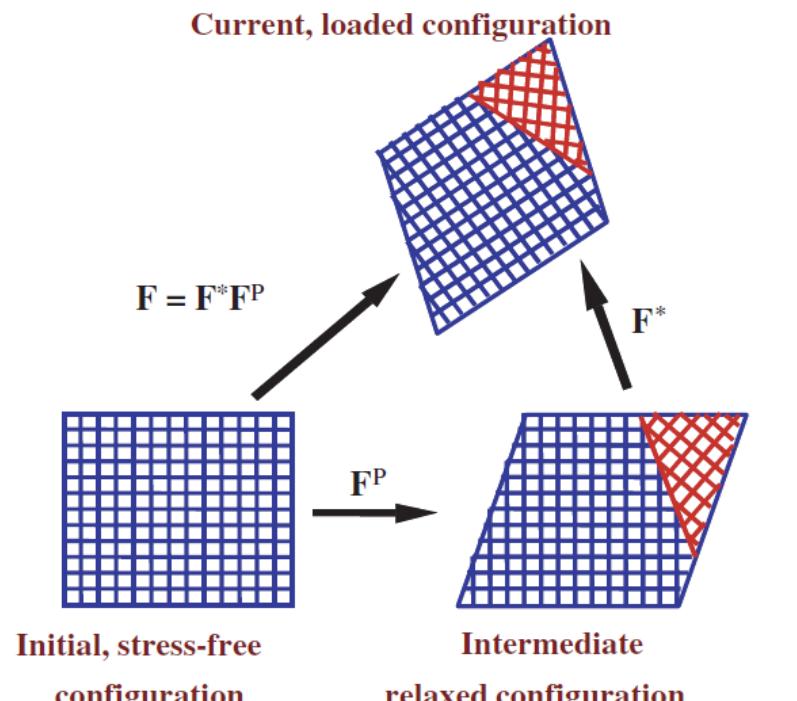
$$\text{滑移的剪切应变率: } \dot{\gamma}^\alpha = \left(1 - f_{\text{tw}}^{\text{tot}}\right) \dot{\gamma}_0^\alpha \left| \frac{\tau^\alpha}{s^\alpha} \right|^n \text{sgn}(\tau^\alpha)$$

$\dot{\gamma}_0^\alpha$ ----滑移的参考剪切应变率

$f_{\text{tw}}^{\text{tot}}$ ----总的孪生体积分数

$$f_{\text{tw}}^{\text{tot}} = \max \left(\sum_{\beta=1}^{N_{\text{tw}}} \gamma^\beta / \gamma_{\text{char}}^\beta, 1.0 \right)$$

$\gamma_{\text{char}}^\beta$ ----是变形孪生的特征应变，其值由孪生系决定
对于FCC和BCC，取0.707



包含变形孪晶的变形梯度的分解

2.2 经典唯象的模型



滑移和孪生的幂律本构方程

将孪生当做一种类滑移的机制处理：

$$\dot{\gamma}^\beta = \left(1 - f_{tw}^{tot}\right) \dot{\gamma}_0^\beta \left| \frac{\tau^\beta}{s^\beta} \right|^n H(\tau^\beta)$$

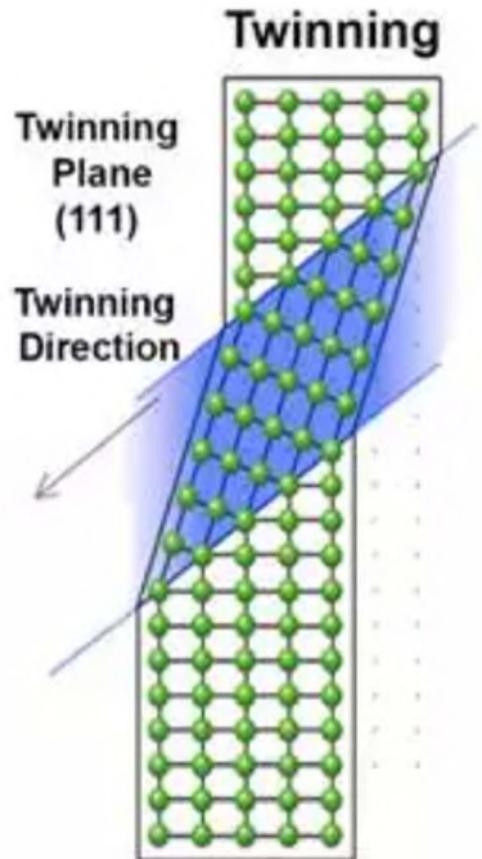
$\dot{\gamma}^\beta$ --- 孪生的剪切应变率

$\dot{\gamma}_0^\beta$ --- 孪生的参考剪切应变率

τ^β --- 孪生面上沿孪生方向的分切应力

s^β --- 孪生系的孪生阻力

H --- HEAVISIDE函数，负向的切应力无法导致孪生变形



滑移和孪生硬化的描述

- 孪生对硬化模型的影响
- ① 变形孪晶导致晶粒内所有滑移系和孪生系的硬化
 - ② 孪晶界类似于晶界 (Hall-petch效应)
 - ③ 孪生导致的Basinski硬化机制
 - ④ 孪生弱化织构，有利于滑移的发生

2.2 经典唯象的模型



滑移和孪生硬化的描述

滑移阻力的变化率：

$$\dot{s}^\alpha = h_0^{s-s} \left(1 + c_1 \left(f_{\text{tw}}^{\text{tot}} \right)^{c_2} \right) \left(1 + h_{\text{int}}^\alpha \right) \times \sum_{\alpha'=1}^{N_s} \left| \dot{\gamma}^{\alpha'} \right| \left| 1 - \frac{s^{\alpha'}}{s_\infty^{\alpha'}} \right|^a \operatorname{sgn} \left(1 - \frac{s^{\alpha'}}{s_\infty^{\alpha'}} \right) h^{\alpha\alpha'} + \sum_{\beta'=1}^{N_{\text{tw}}} \dot{\gamma}^{\beta'} h^{\alpha\beta'}$$

h_0^{s-s} 、 h_{int} 、 c_1 、 c_2 ----模型的拟合参数

s_∞ ----阻力演变的极限

孪生阻力的变化率：

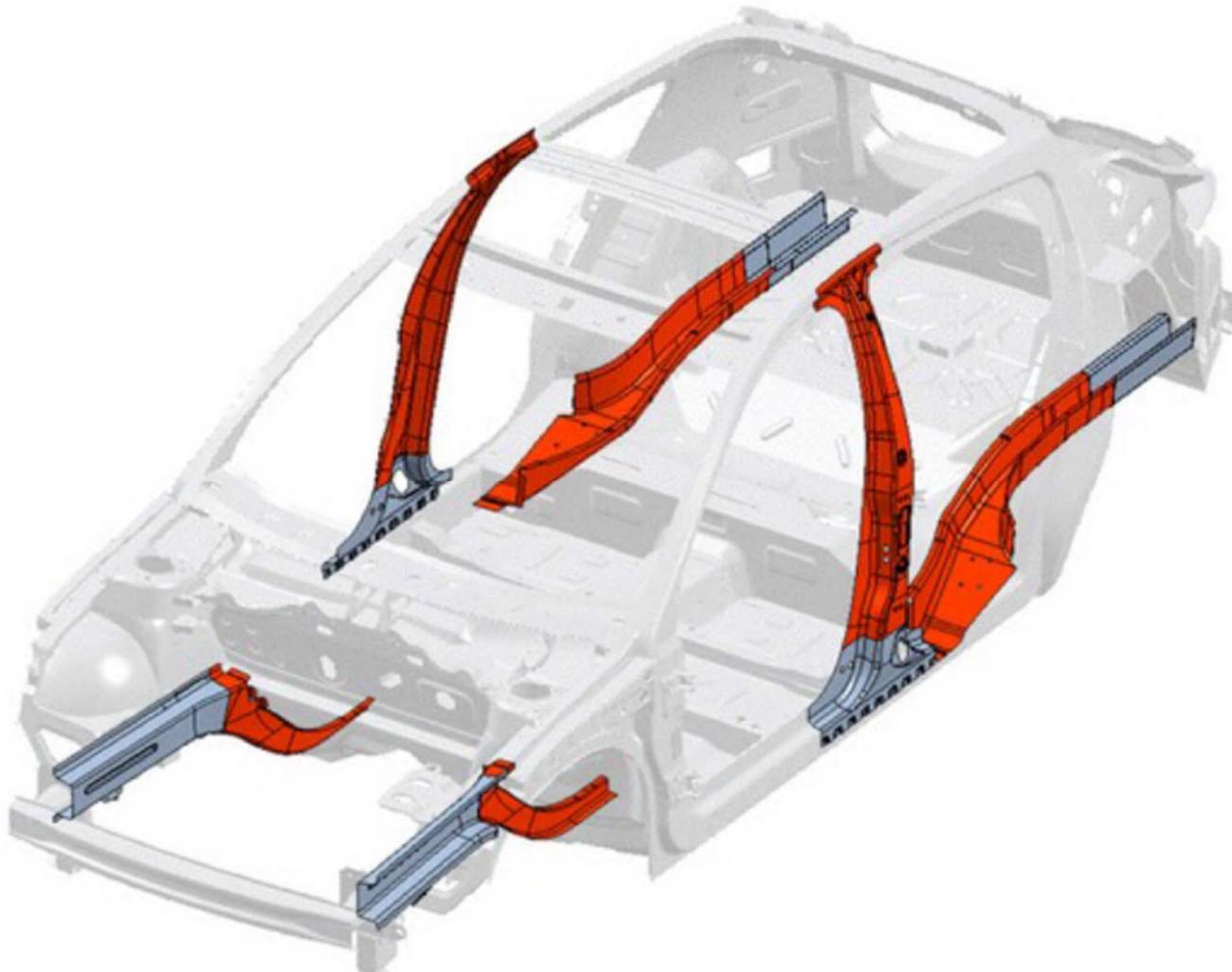
$$\dot{s}^\beta = h_0^{\text{tw-s}} \left(\sum_{\alpha=1}^{N_s} \left| \gamma^\alpha \right| \right)^{c_3} \sum_{\alpha'=1}^{N_s} \left| \dot{\gamma}^{\alpha'} \right| h^{\beta\alpha'} + h_0^{\text{tw-tw}} \left(f_{\text{tw}}^{\text{tot}} \right)^{c_4} \sum_{\beta'=1}^{N_{\text{tw}}} \dot{\gamma}^{\beta'} h^{\beta\beta'}$$

$h_0^{\text{tw-s}}$ 、 $h_0^{\text{tw-tw}}$ 、 c_3 、 c_4 ----模型的拟合参数

2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型

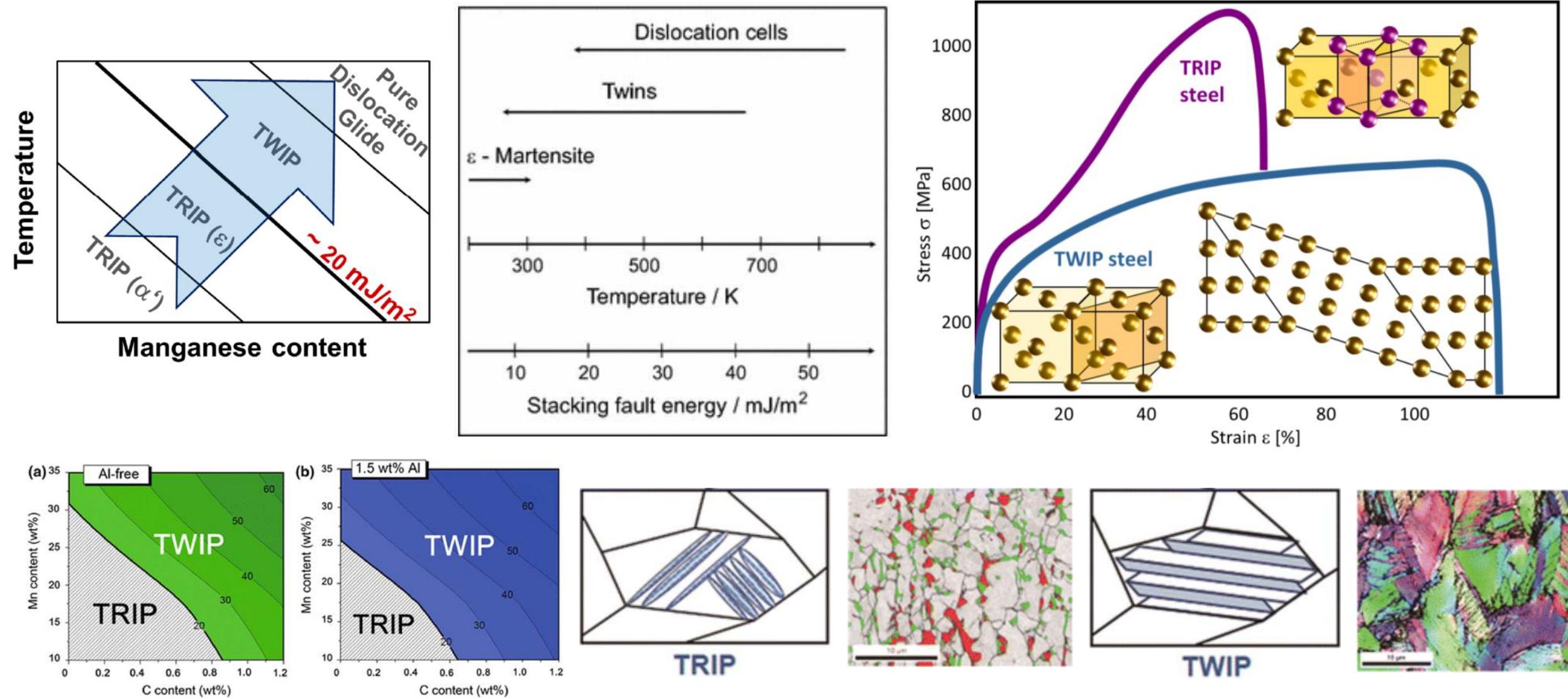


高性能TRIP钢在汽车中的应用



2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型

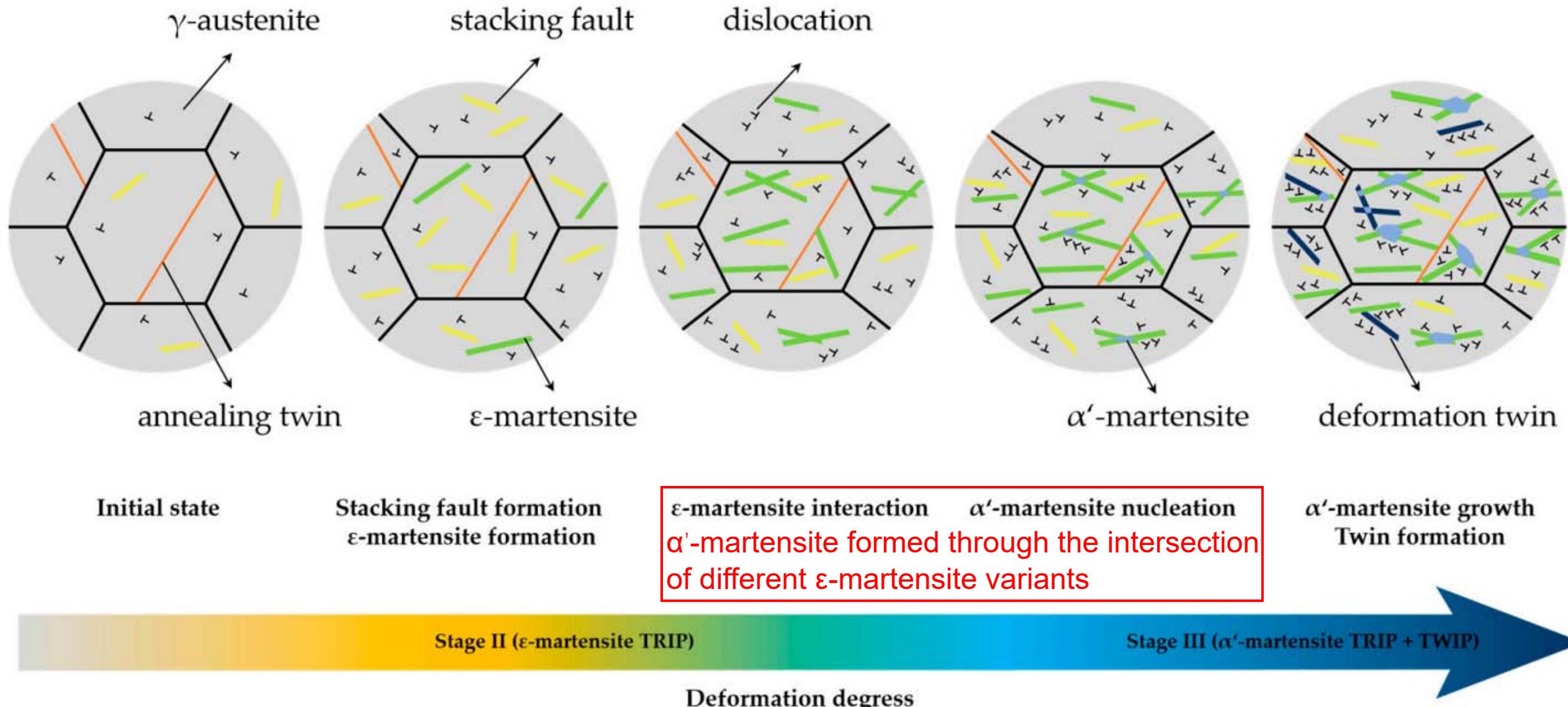
典型的多塑性机制金属材料：TWIP/TRIP钢



2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



多塑性机制材料的微观变形机理 以Fe-17Mn-1.5Al-0.3C钢为例

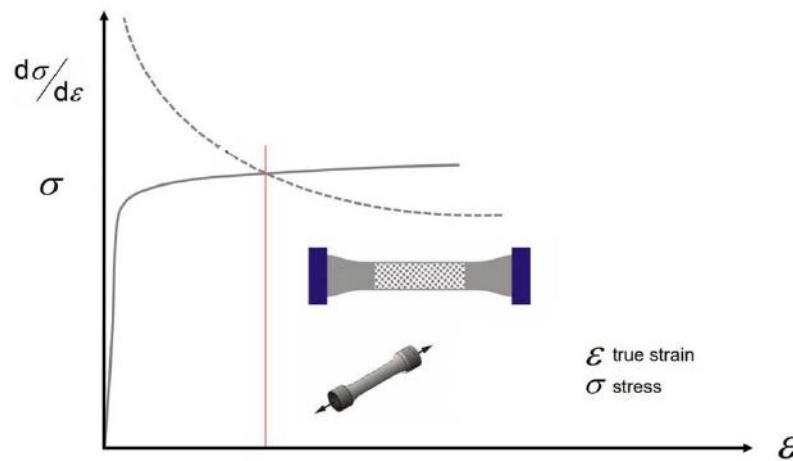


2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型

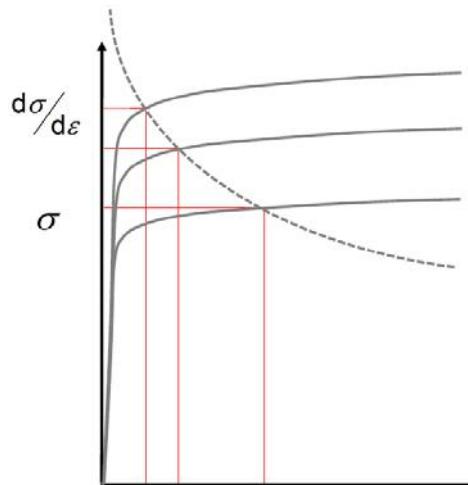


孪生和相变机制对材料强韧性的的影响

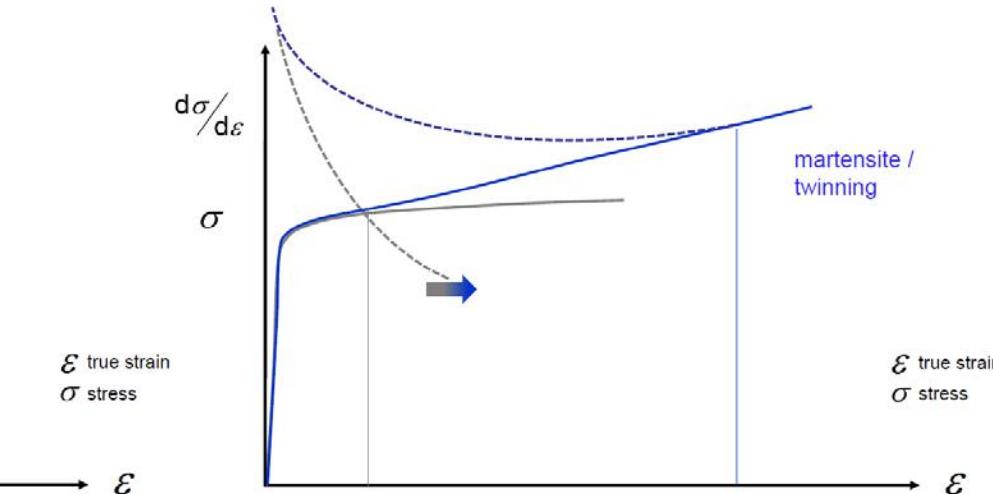
均匀延伸率的计算(Considère准则):



强度和韧性的倒置关系



应变硬化能力有利于提高材料的韧性

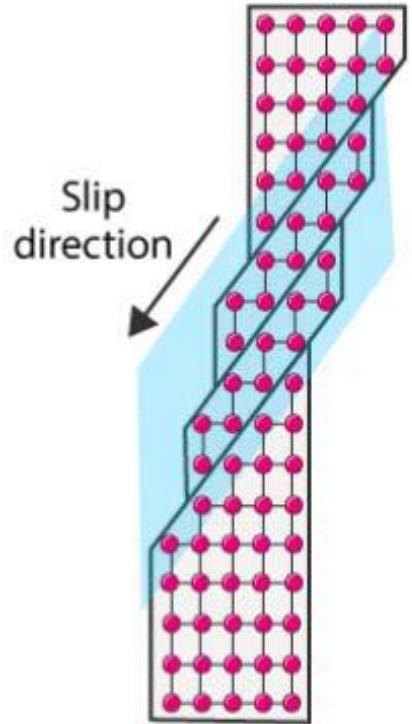


$$d\sigma / d\varepsilon = \sigma$$

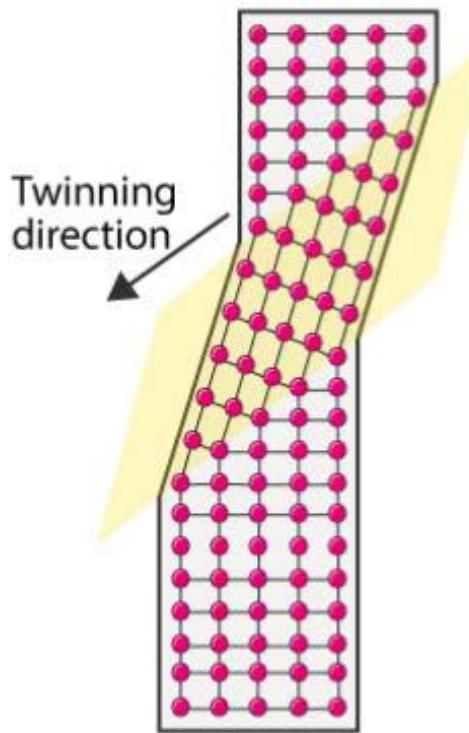
2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



金属中常见的塑性变形机制

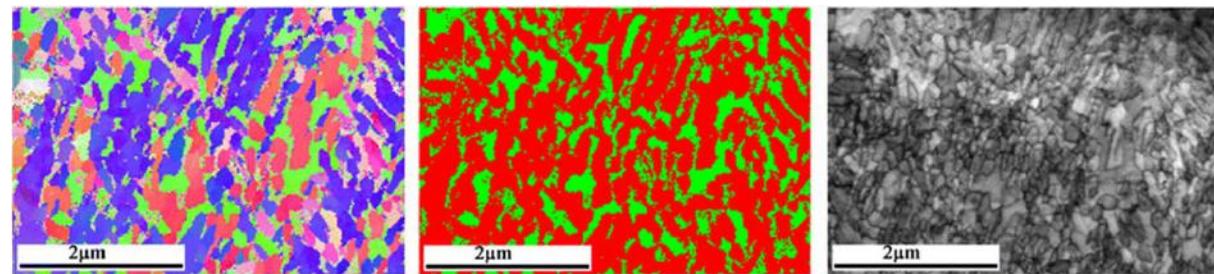
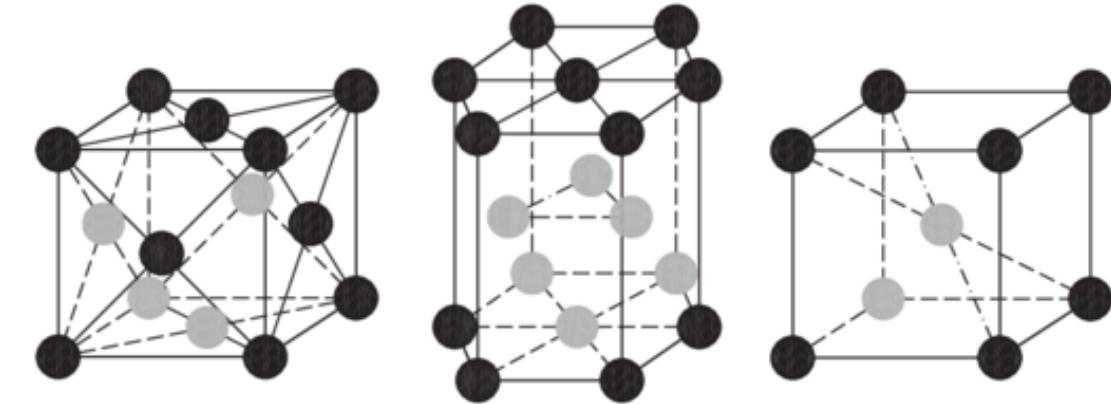


位错滑移



变形孪生

(a) γ - Austenite (b) ε - Martensite (c) α' - Martensite



(a)

(b)

(c)

相变

考虑多种塑性变形机制时的塑性速度梯度

$$L_p = \left(1 - \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} f^\beta - \sum_{\chi=1}^{N_{tr}} f^\chi \right) \sum_{\alpha=1}^{N_s} \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha + \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} \dot{\gamma}^\beta \mathbf{m}_{tw}^\beta \otimes \mathbf{n}_{tw}^\beta + \sum_{\chi=1}^{N_{tr}} \dot{\gamma}^\chi \mathbf{m}_{tr}^\chi \otimes \mathbf{n}_{tr}^\chi$$

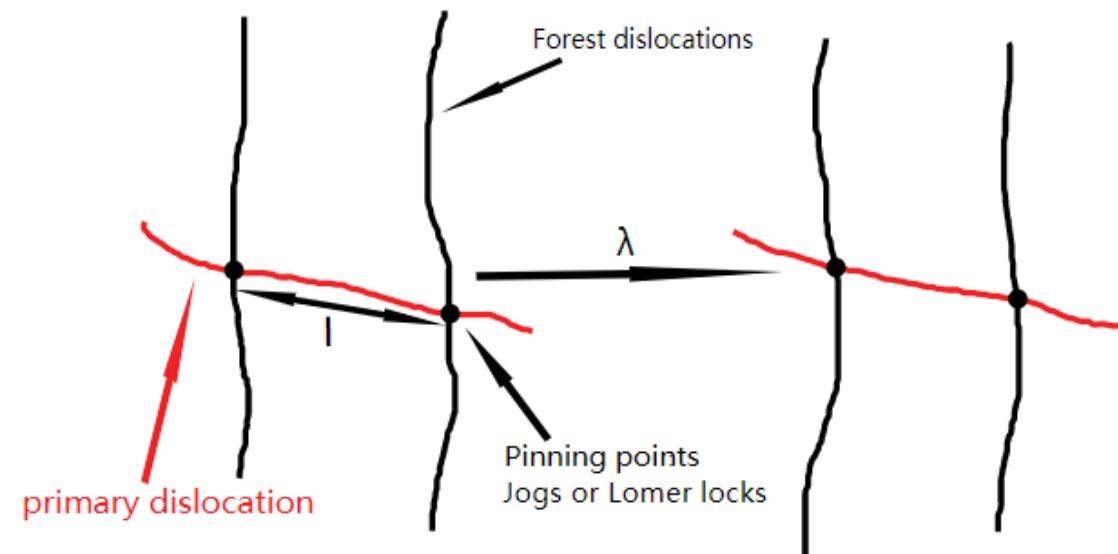
2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



位错滑移导致的塑性变形

滑移剪切率

$$\dot{\gamma}^\alpha = \rho b v_0 \exp \left[-\frac{Q_s}{k_B T} \left(1 - \left(\frac{\langle |\tau^\alpha - \tau_b^\alpha| - \tau_p^\alpha \rangle^p}{\tau_0 + \tau_{ss}} \right)^q \right) \right] \text{sign}(\tau^\alpha - \tau_b^\alpha)$$



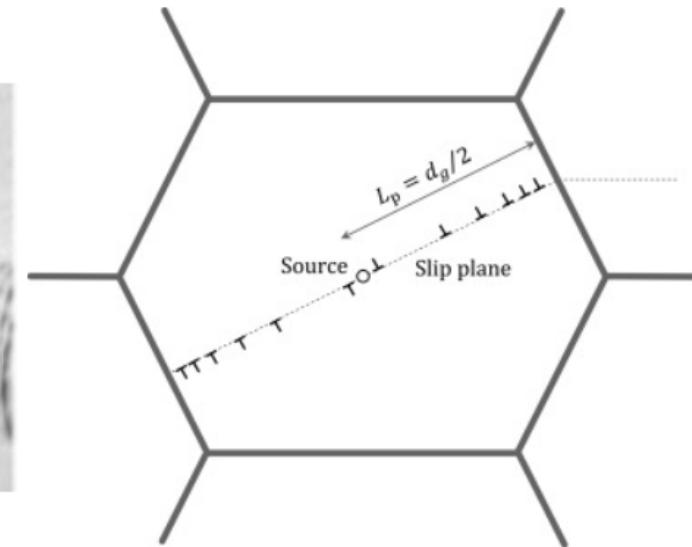
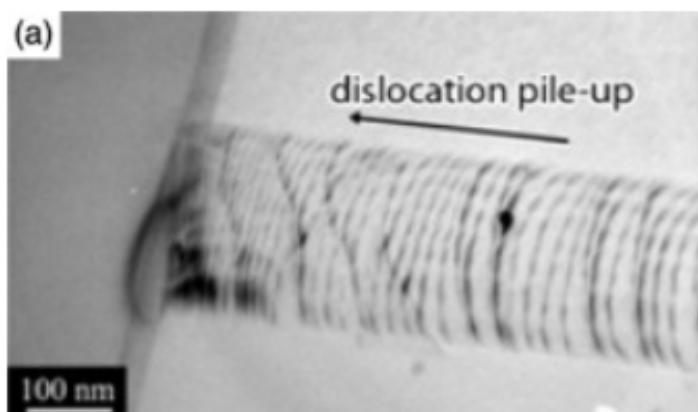
泰勒强化的来源—林位错障碍

$$\tau_p^\alpha = Gb \left(\sum_{\alpha'=1}^{N_s} \xi_{\alpha\alpha'} \rho^{\alpha'} \right)^{1/2}$$

背应力的来源—位错塞积

$$\dot{\tau}_b^\alpha = c \dot{\gamma}^\alpha - d \tau_b^\alpha |\dot{\gamma}^\alpha|$$

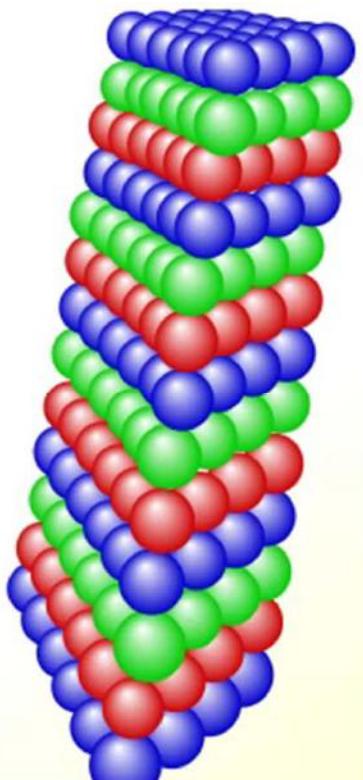
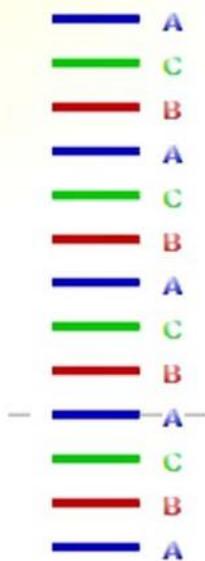
$$d = d_0 + (d_s - d_0) \left(1 - \exp \left(-\frac{\rho_{\text{all}}}{\rho_{\text{ref}}} \right) \right)$$



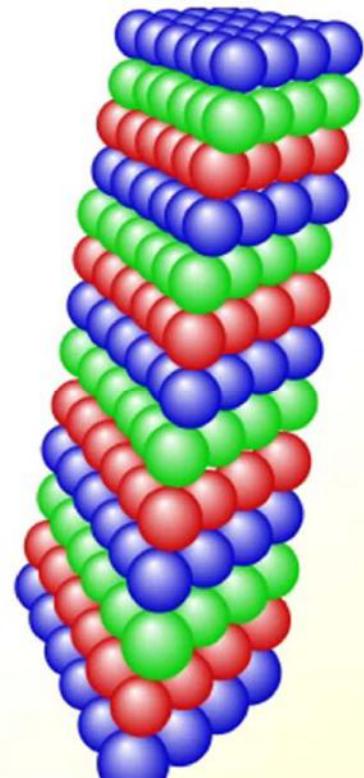
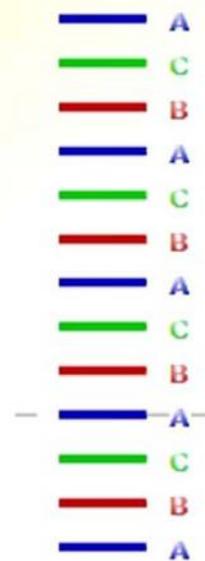
2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



Twinning FCC



Martensitic transformation
FCC to HCP



2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型

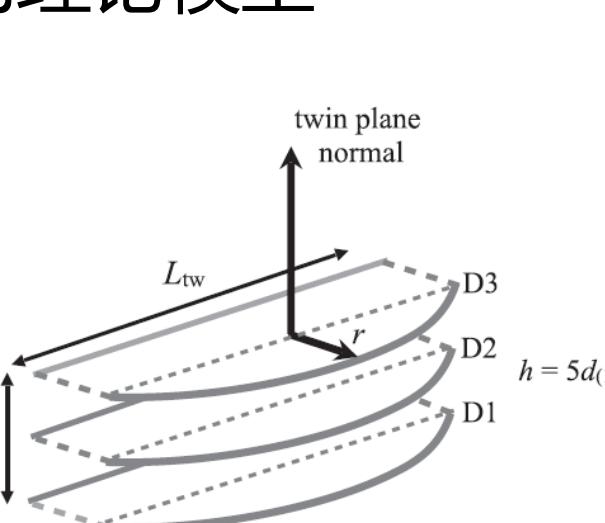


孪晶和马氏体形核的理论模型

孪晶形核

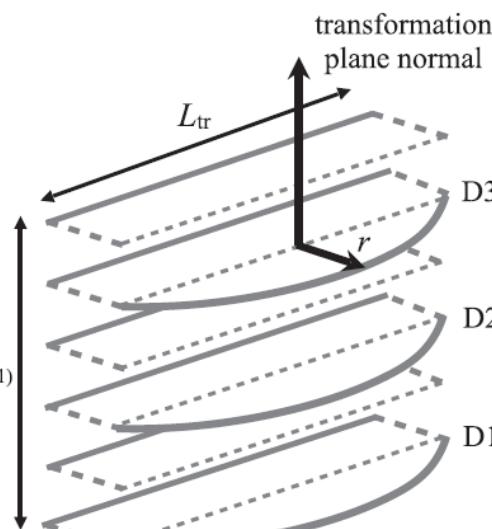
$$Q_{\text{total}} = Q_{\text{work}} + Q_{\text{sf}} + Q_{\text{line}}$$

$$\begin{cases} Q_{\text{work}} = -3b_{\text{tw}} \tau A(r, L_{\text{tw}}) \\ Q_{\text{sf}} = \Gamma_{\text{sf}} A(r, L_{\text{tw}}) \\ Q_{\text{line}} = \frac{9}{2} G b_{\text{tw}}^2 B(r, L_{\text{tw}}) \end{cases}$$



当 $r \leq L/2$ 时

$$A(r, L) = \frac{Lr}{4} - \frac{L^3}{16r} + \left(\frac{r^2}{4} + \frac{L^4}{64r^2} + \frac{L^2}{8} \right) \arcsin \left(\frac{4Lr}{L^2 + 4r^2} \right)$$



马氏体形核

$$Q_{\text{total}} = Q_{\text{work}} + Q_{\text{int}} + Q_{\text{line}} + Q_{\text{trans}}$$

$$\begin{cases} Q_{\text{work}} = -3b_{\text{tr}} \tau A(r, L_{\text{tr}}) \\ Q_{\text{int}} = 2\sigma^{\gamma/\varepsilon} A(r, L_{\text{tr}}) \\ Q_{\text{line}} = \frac{9}{2} G b_{\text{tr}}^2 B(r, L_{\text{tr}}) \\ Q_{\text{trans}} = h A(r, L_{\text{tr}}) \Delta G^{\gamma \rightarrow \varepsilon} \end{cases}$$

当 $r > L/2$ 时

$$A(r, L) = \frac{Lr}{4} - \frac{L^3}{16r} + \left(\frac{r^2}{4} + \frac{L^4}{64r^2} + \frac{L^2}{8} \right) \left(\pi - \arcsin \left(\frac{4Lr}{L^2 + 4r^2} \right) \right)$$

$$B(r, L) = \left(r + \frac{L^2}{4r} \right) \left(\pi - \arcsin \left(\frac{4Lr}{L^2 + 4r^2} \right) \right) - L$$

孪晶形核临界应力 $\hat{\tau}_{\text{tw}} = \frac{\Gamma_{\text{sf}}}{3b_{\text{tw}}} + \frac{3Gb_{\text{tw}}}{L_{\text{tw}}}$

马氏体形核临界应力 $\hat{\tau}_{\text{tr}} = \frac{2\sigma^{\gamma/\varepsilon}}{3b_{\text{tr}}} + \frac{3Gb_{\text{tr}}}{L_{\text{tr}}} + \frac{h\Delta G^{\gamma \rightarrow \varepsilon}}{3b_{\text{tr}}}$

2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



孪生/相变导致的塑性变形

剪切率 $\dot{\gamma}^{\beta/\chi} = \gamma_{\text{tw/tr}} \dot{f}^{\beta/\chi} = \gamma_{\text{tw/tr}} (1 - f_{\text{tw}} - f_{\text{tr}}) V^{\beta/\chi} \dot{N}_{\text{tw/tr}}^{\beta/\chi}$

体积演化 $V^{\beta/\chi} = \frac{\pi}{4} \Lambda_{\text{tw/tr}}^2 t_{\text{tw/tr}}$

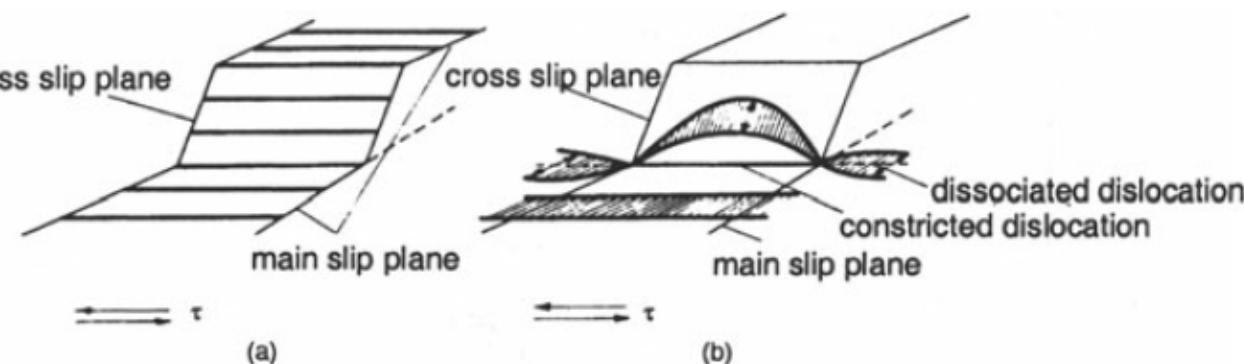
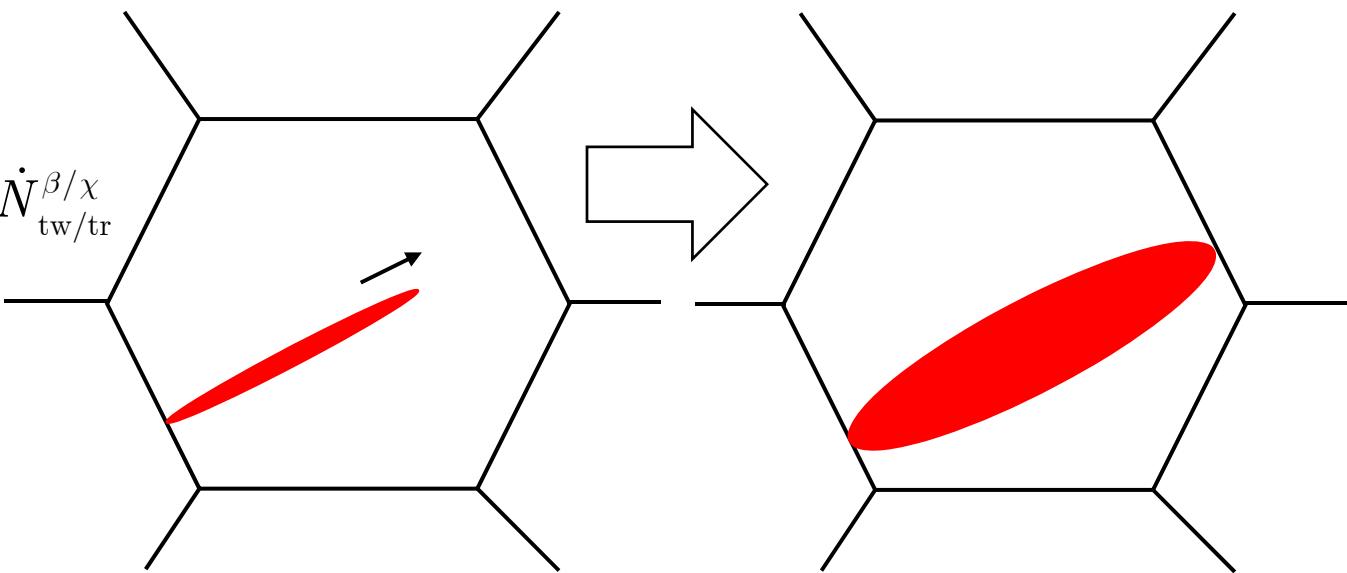
真实形核率 $\dot{N}_{\text{tw/tr}}^{\beta/\chi} = \dot{N}_0 p_{\text{grow}} p_{\text{ncs}}$

初始形核率 $\dot{N}_0 = \frac{\rho^i |\dot{\gamma}^j| + \rho^j |\dot{\gamma}^i|}{L_{\text{tw/tr}}}$

i, j 指co-planar
的两个滑移系

生长率 $p_{\text{grow}} = \exp \left[- \left(\frac{\hat{\tau}_{\text{tw/tr}}}{\tau^{\beta/\chi}} \right)^A \right]$

不发生交滑移的概率 $p_{\text{ncs}} = 1 - \exp \left[- \frac{V_{\text{cs}}}{k_B T} (\tau_r - \tau^{\beta/\chi}) \right]$



位错交滑移不利于孪晶和马氏体的形核

$$\tau_r = \frac{Gb}{2\pi(x_0 + x_c)} + \frac{Gbc\cos(\pi/3)}{2\pi x_0}$$

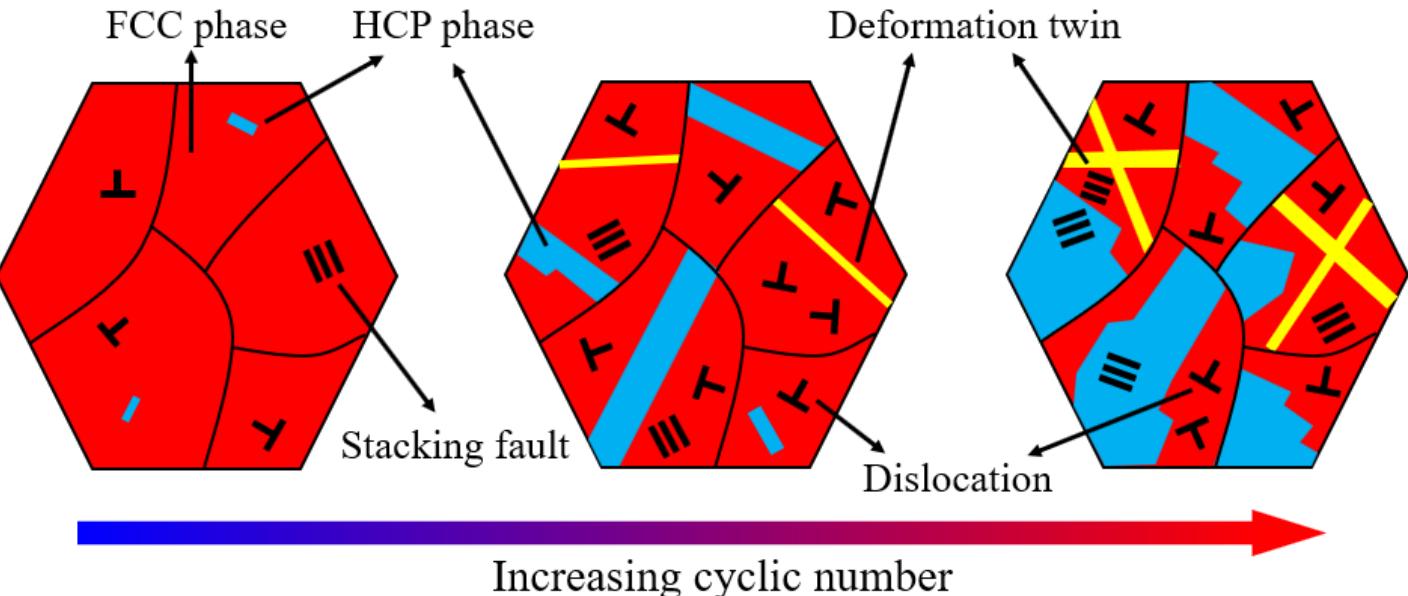
$$x_0 = \frac{G}{\Gamma_{\text{sf}}} \frac{b^2}{8\pi} \frac{2+\nu}{1-\nu}$$

2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



界面对位错平均自由程的影响

内界面与位错



位错密度演化

$$\dot{\rho}^\alpha = \frac{|\dot{\gamma}^\alpha|}{b} \left(\frac{1}{k\Lambda_s^\alpha} - 2d_{\text{anni}}\rho^\alpha \right)$$

位错平均自由程

$$\frac{1}{\Lambda_s^\alpha} = \frac{1}{d} + \frac{1}{\lambda_{\text{slip}}^\alpha} + \frac{1}{\lambda_{\text{sliptwin}}^\alpha} + \frac{1}{\lambda_{\text{sliptrans}}^\alpha}$$

$$\begin{cases} \frac{1}{\lambda_{\text{slip}}^\alpha} = \frac{1}{i_{\text{slip}}} \left(\sum_{\alpha'=1}^{N_s} \xi_{\alpha\alpha'} \rho^{\alpha'} \right)^{1/2} \\ \frac{1}{\lambda_{\text{sliptwin}}^\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{tw}}} \xi_{\alpha\beta} f^\beta \frac{1}{t_{\text{tw}} (1 - f_{\text{tw}})} \\ \frac{1}{\lambda_{\text{sliptrans}}^\alpha} = \sum_{\chi=1}^{N_{\text{tr}}} \xi_{\alpha\chi} f^\chi \frac{1}{t_{\text{tr}} (1 - f_{\text{tr}})} \end{cases}$$

不同滑移系之间的交互作用

滑移系与孪生系之间的交互作用

滑移系与相变系之间的交互作用

2.3 位错-孪生-相变多机制晶体塑性本构模型



FCC结构滑移系之间交互作用

交互
作用
矩阵

α'	A2	A3	A6	B2	B4	B5	C1	C3	C5	D1	D4	D6
α	A2	I	II	III	V	V	IV	V	VI	IV	VI	V
A3	II	I	II	V	IV	VI	V	III	V	VI	IV	V
A6	II	II	I	V	VI	IV	VI	V	IV	V	V	III
B2	III	V	V	I	II	I	IV	VI	V	IV	V	VI
B4	V	IV	VI	II	I	II	VI	IV	V	V	III	V
B5	V	VI	IV	II	II	I	V	V	III	VI	V	IV
C1	IV	V	VI	IV	VI	V	I	II	II	III	V	V
C3	V	III	V	VI	IV	V	II	I	II	V	IV	VI
C5	VI	V	IV	V	V	III	II	II	I	V	VI	IV
D1	IV	VI	V	IV	V	VI	III	V	V	I	II	II
D4	VI	IV	V	V	III	V	V	IV	VI	II	I	II
D6	V	V	III	VI	V	IV	V	VI	IV	II	II	I

I. 滑移系的自硬化 (self-hardening)

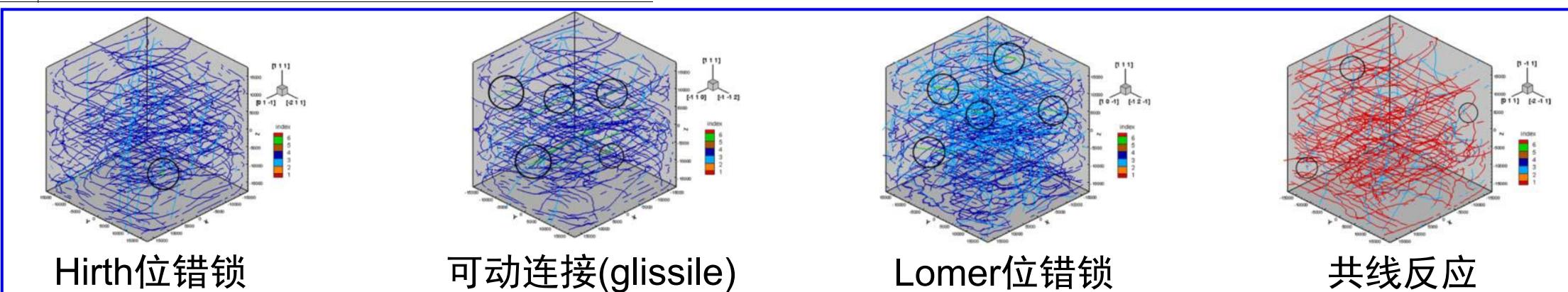
II. 共面硬化, 同一滑移面不同滑移系相互作用

III. 共线反应, $\frac{a}{2}[01\bar{1}](1\bar{1}\bar{1}) + \frac{a}{2}[0\bar{1}1](111) \rightarrow$ 湮灭

IV. Hirth位错锁, $\frac{a}{2}[101](1\bar{1}\bar{1}) + \frac{a}{2}[10\bar{1}](\bar{1}1\bar{1}) \rightarrow \frac{a}{2}[200](001)$

V. 可动连接, $\frac{a}{2}[101](\bar{1}\bar{1}1) + \frac{a}{2}[01\bar{1}](1\bar{1}\bar{1}) \rightarrow \frac{a}{2}[110](1\bar{1}\bar{1})$

VI. Lomer位错锁, $\frac{a}{2}[101](\bar{1}\bar{1}1) + \frac{a}{2}[01\bar{1}](1\bar{1}\bar{1}) \rightarrow \frac{a}{2}[110](1\bar{1}\bar{1})$



离散位
错动力
学模拟

2.4 应变梯度晶体塑性模型



本构方程

$$\mathbf{S} = \mathbf{C} : \mathbf{E}_e$$

$$\mathbf{E}_e = \frac{1}{2} (\mathbf{F}_e^T \cdot \mathbf{F}_e - \mathbf{I})$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p \Leftrightarrow \mathbf{F}_e = \mathbf{F} \mathbf{F}_p^{-1}$$

$$\mathbf{L}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} \Leftrightarrow \dot{\mathbf{F}}_p = \mathbf{L}_p \mathbf{F}_p$$

$$\mathbf{L}_p = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha$$

$$\boldsymbol{\tau}^\alpha = \mathbf{S} : (\mathbf{s}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha) - \boldsymbol{\tau}_b^\alpha$$

$$\dot{\gamma}^\alpha = \sum_p \dot{\gamma}_p^\alpha = \sum_p \rho_{p,\text{mob}}^\alpha v_p^\alpha b$$

位错密度演化

- 位错增殖
- 位错形态转变
- 位错湮灭
- 位错流动

晶粒尺寸效应

位错类型

- I. 按极性分为单位错(monopolar)和位错偶(dipole)；
- II. 按类型分为刃型(edge)和螺型(screw)；
- III. 按方向分为正(positive)和负(negative)；
- IV. 按单位错的可动性分为可动(mobile)和不可动(immobile)单位错。

例: $\rho_{e+, \text{mob}}^\alpha$ 表示 α 滑移系上的正刃型可动位错

位错密度

总位错密度

$$\rho^\alpha = \rho_e^\alpha + \rho_s^\alpha$$

总刃型位错密度

GND密度

$$\rho_e^\alpha = \rho_{e+}^\alpha + \rho_{e-}^\alpha + \rho_{e,\text{dip}}^\alpha$$

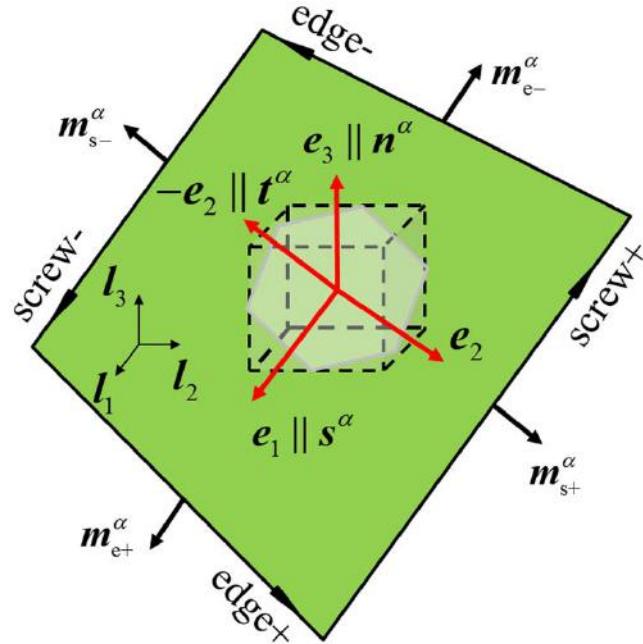
$$\rho_{\Delta e}^\alpha = \rho_{e+}^\alpha - \rho_{e-}^\alpha$$

$$\rho_s^\alpha = \rho_{s+}^\alpha + \rho_{s-}^\alpha + \rho_{s,\text{dip}}^\alpha$$

$$\rho_{\Delta s}^\alpha = \rho_{s+}^\alpha - \rho_{s-}^\alpha$$

2.4 应变梯度晶体塑性模型

位错密度演化 (考虑晶粒尺寸效应)



位错环扩张

位错运动方向、伯格氏矢量与滑移坐标
和晶格坐标系之间的关系

➤ 位错增殖

$$\text{mult } \dot{\rho}_p^\alpha = \frac{\left(|\dot{\gamma}_{e^+}^\alpha| + |\dot{\gamma}_{e^-}^\alpha| \right) * k_1}{b} + \left(|\dot{\gamma}_{s^+}^\alpha| + |\dot{\gamma}_{s^-}^\alpha| \right) \frac{1}{k_2 \lambda_f^\alpha}$$

刃型部分的贡献

考虑晶粒尺寸对位错
平均自由程的影响 $\frac{1}{\lambda_f^\alpha} = \frac{1}{d} + \sqrt{\rho_f^\alpha}$

林位错密度 $\rho_f^\alpha = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{slip}}} \left(\rho_e^\beta |\mathbf{n}^\alpha \cdot \mathbf{t}^\beta| + \rho_s^\beta |\mathbf{n}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\beta| \right)$

➤ 位错形态转变

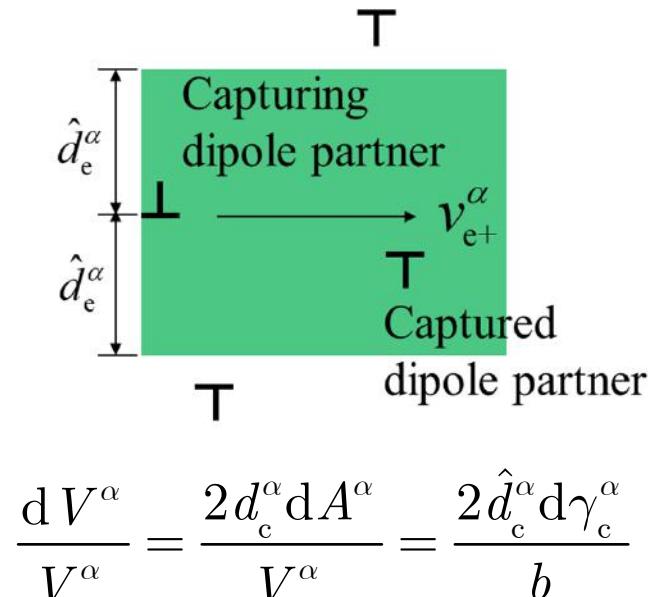
不可动 \rightarrow 可动

$$\begin{aligned} \text{remob } \rho_{p,\text{imm}} &= -|\rho_{p,\text{imm}}| \\ \text{remob } \rho_{p,\text{mob}} &= |\rho_{p,\text{imm}}| \end{aligned}$$

2.4 应变梯度晶体塑性模型

位错密度演化 (考虑晶粒尺寸效应)

➤ 位错形态转变



单位错相互捕获→位错偶

$$\begin{aligned}
 & \text{mob} \rightarrow \text{dip} \quad \dot{\rho}_{c+, \text{mob}}^\alpha = \frac{-2\hat{d}_c^\alpha}{b} \left(\rho_{c+, \text{mob}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c-}^\alpha| + \rho_{c-, \text{mob}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c+}^\alpha| + \rho_{c-, \text{imm}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c+}^\alpha| \right) \\
 & \text{mob} \rightarrow \text{dip} \quad \dot{\rho}_{c-, \text{mob}}^\alpha = \frac{-2\hat{d}_c^\alpha}{b} \left(\rho_{c-, \text{mob}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c+}^\alpha| + \rho_{c+, \text{mob}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c-}^\alpha| + \rho_{c+, \text{imm}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c-}^\alpha| \right) \\
 & \text{mob} \rightarrow \text{dip} \quad \dot{\rho}_{c+, \text{imm}}^\alpha = \frac{-2\hat{d}_c^\alpha}{b} \left(\rho_{c+, \text{imm}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c-}^\alpha| \right) \\
 & \text{mob} \rightarrow \text{dip} \quad \dot{\rho}_{c-, \text{imm}}^\alpha = \frac{-2\hat{d}_c^\alpha}{b} \left(\rho_{c-, \text{imm}}^\alpha |\dot{\gamma}_{c+}^\alpha| \right) \\
 & \text{mob} \rightarrow \text{dip} \quad \dot{\rho}_{c, \text{dip}}^\alpha = 4\hat{d}_c^\alpha \left(\rho_{c+}^\alpha \frac{|\dot{\gamma}_{c-}^\alpha|}{b} + \rho_{c-}^\alpha \frac{|\dot{\gamma}_{c+}^\alpha|}{b} \right)
 \end{aligned}$$

位错偶分解→单位错

$$\begin{cases} \text{dip} \rightarrow \text{mob} \quad \rho_{c, \text{dip}}^\alpha = \rho_{c, \text{dip}}^\alpha \frac{\Delta \hat{d}_c^\alpha}{\hat{d}_c^\alpha - \breve{d}_c^\alpha} \xrightarrow{\text{间距变化}} \\ \text{dip} \rightarrow \text{mob} \quad \rho_{c+, \text{mob}}^\alpha = \text{dip} \rightarrow \text{mob} \quad \rho_{c-, \text{mob}}^\alpha = -\frac{1}{2} \text{ dip} \rightarrow \text{mob} \quad \rho_{c, \text{dip}}^\alpha \end{cases}$$

$\hat{d}_c^\alpha, \breve{d}_c^\alpha$ 上下界

2.4 应变梯度晶体塑性模型

位错密度演化 (考虑晶粒尺寸效应)

➤ 位错湮灭

I. 刃型位错攀移导致位错偶湮灭(热激活) $\dot{\rho}_{e,dip}^{\alpha} = -\rho_{e,dip}^{\alpha} \frac{2v_{climb}^{\alpha}}{(\hat{d}_c^{\alpha} - \check{d}_c^{\alpha})/2} \xrightarrow{\text{攀移速度}}$

II. 位错偶中单位错间距小于临界值 $\dot{\rho}_{c,dip}^{\alpha} = -2 \frac{\check{d}_c^{\alpha}}{b} (\rho_{c+}^{\alpha} |\dot{\gamma}_{c-}^{\alpha}| + \rho_{c-}^{\alpha} |\dot{\gamma}_{c+}^{\alpha}|)$

螺位错交滑移湮灭留下刃型割阶 $\dot{\rho}_{e+,mob}^{\alpha} = \dot{\rho}_{e-,mob}^{\alpha} = -k_3 \frac{\dot{\rho}_{s,dip}^{\alpha}}{2} \frac{l_{jog}^{\alpha}}{\lambda_f^{\alpha}} \xrightarrow{\text{割阶长度}}$

III. 单位错冲击位错偶 $\dot{\rho}_{c,dip}^{\alpha} = -\frac{2\check{d}_c^{\alpha}}{b} \rho_{c,dip}^{\alpha} (|\dot{\gamma}_{c-}^{\alpha}| + |\dot{\gamma}_{c+}^{\alpha}|)$

IV. 晶界对位错的吸收作用 $\dot{\rho}_{p,mob}^{\alpha} = -k_{ann} \left(\frac{d_e}{d} \right)^2 \rho_{p,mob}^{\alpha} |\dot{\gamma}_p^{\alpha}|$

2.4 应变梯度晶体塑性模型

位错密度演化 (考虑晶粒尺寸效应)



➤ 位错流动

塑性畸变与位错密度之间的关系

$$\sum_p \rho_p^\alpha \mathbf{l}_p^\alpha \otimes \mathbf{b} = \mathbf{a}^\alpha = -\operatorname{curl} \boldsymbol{\beta}_p^\alpha$$

$$\sum_{\Delta c} \rho_{\Delta c} \mathbf{l}_{c+} \otimes \mathbf{b} = \mathbf{a} = -\operatorname{curl} (\gamma \mathbf{n} \otimes \mathbf{s})$$

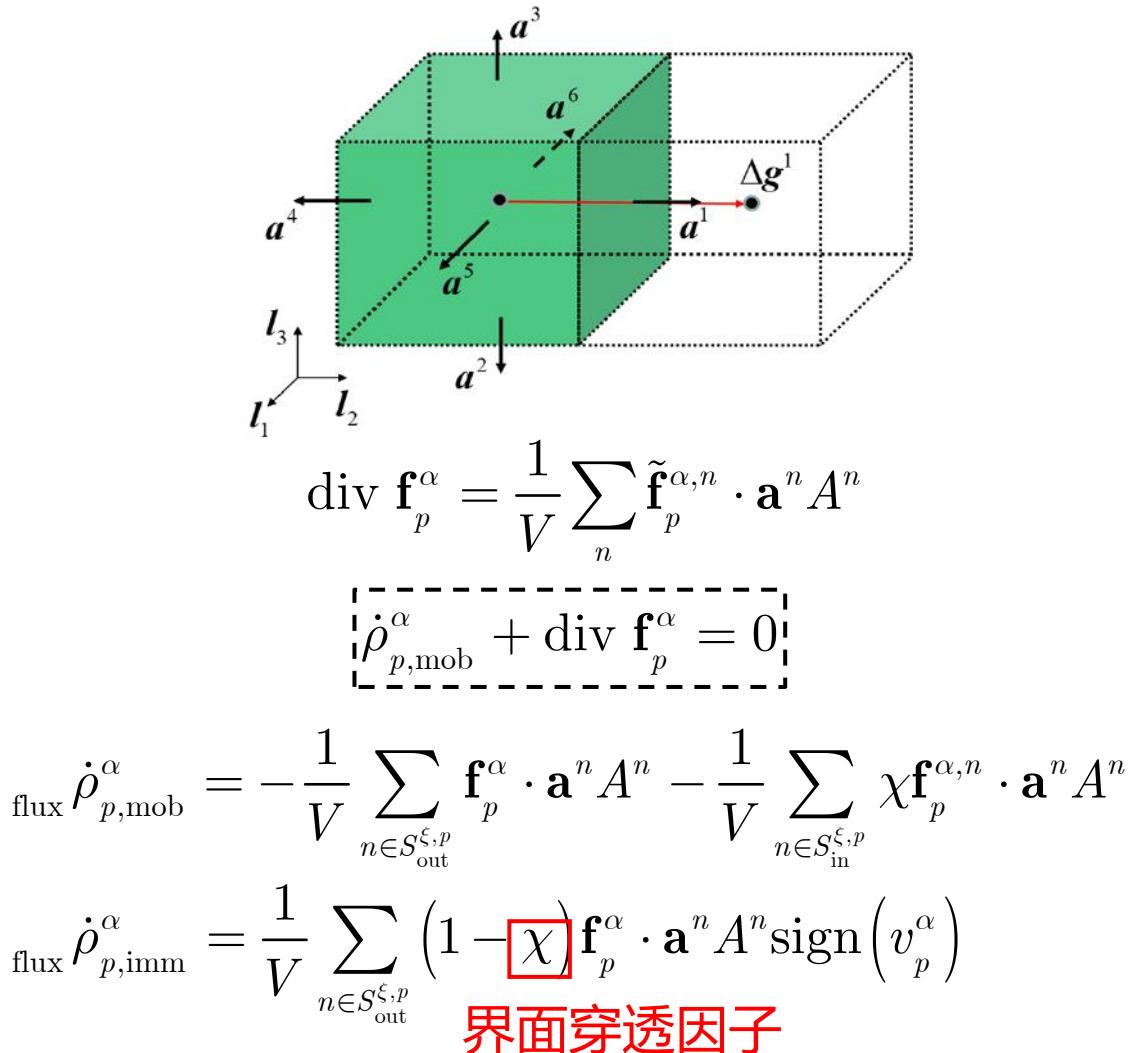
$$\partial_t \rho_{e+} + \operatorname{grad}_s (\rho_{e+} v_{e+}) = 0$$

$$\partial_t \rho_{e-} - \operatorname{grad}_s (\rho_{e-} v_{e-}) = 0$$

$$\partial_t \rho_{s+} - \operatorname{grad}_t (\rho_{s+} v_{s+}) = 0$$

$$\partial_t \rho_{s-} + \operatorname{grad}_t (\rho_{s-} v_{s-}) = 0$$

位错流量 $\mathbf{f}_p^\alpha = \rho_{p,\text{mob}}^\alpha \mathbf{v}_p^\alpha$



2.4 应变梯度晶体塑性模型

位错运动速度 (考虑晶粒尺寸效应)

➤ 滑移

$$v^\alpha = \frac{\lambda}{t_p + t_s + \frac{\lambda}{v_{\text{viscous}}^\alpha}} \operatorname{sgn}(\tau^\alpha) = \frac{1}{\frac{t_p}{\lambda_p} + \frac{t_s}{\lambda_s} + \frac{1}{v_{\text{viscous}}^\alpha}} \operatorname{sgn}(\tau^\alpha)$$

晶格阻碍: $t_{\text{peierls}} = \frac{1}{f_{\text{attack}}} \exp \left[\frac{Q_p}{k_B T} \left(1 - \left(\frac{|\tau^\alpha| - \hat{\tau}_{\text{cr}}^\alpha}{P_{\text{peierls}}} \right)^p \right)^q \right]$

固溶阻碍: $t_{\text{ss}} = \frac{1}{f_{\text{attack}}} \exp \left[\frac{Q_s}{k_B T} \left(1 - \left(\frac{|\tau^\alpha| - \hat{\tau}_{\text{cr}}^\alpha}{P_{\text{ss}}} \right)^p \right)^q \right]$

粘滞速度: $v_{\text{viscous}} = \frac{b}{v_0} (|\tau^\alpha| - \hat{\tau}_{\text{cr}}^\alpha)$

长程障碍力: $\hat{\tau}_{\text{cr}}^\alpha = Gb \sqrt{\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \xi^{\alpha\alpha} \left(\sum_p |\rho_p^\alpha| + \sum_p |\rho_{\text{c,dip}}^\alpha| \right)} + \frac{k_{\text{HP}}}{\sqrt{d}}$

➤ 攀移

$$v_{\text{climb}}^\alpha = \frac{D_{\text{SD}}}{b} \left[\exp \left(\frac{\Omega \sigma_c^\alpha}{k_B T} \right) - 1 \right]$$

驱动力: $\sigma_c^\alpha = \frac{Gb}{2\pi(1-v)} \frac{2}{\hat{d}_e^\alpha + \check{d}_e^\alpha}$

f_{attack}	位错尝试越过障碍频率
Q	激活能
k_B	Boltzmann常数
P	障碍强度
T	温度
p, q	常数
D_{SD}	空位扩散系数
Ω	原子体积

2.4 应变梯度晶体塑性模型

背应力演化

Groma等人(2003)对离散位错的运动方程进行统计平均，得到背应力，

$$\tau_b^\alpha = \frac{DGb}{2\pi} \left(\frac{\text{grad}_s \rho_{\Delta e}^\alpha}{\rho_e (1-v)} + \frac{\text{grad}_t \rho_{\Delta s}^\alpha}{\rho_s} \right)$$

Evers和Bayley等人(2004, 2006)对某圆域内的位错在中心位置的作用力进行积分计算，得到背应力，

$$\tau_b^\alpha = \frac{GbR^2}{8} \left(\frac{\text{grad}_s \rho_{\Delta e}^\alpha}{(1-v)} + 2\text{grad}_t \rho_{\Delta s}^\alpha \right)$$

$$\tau_b = - \left(\frac{A}{\rho} \right) \frac{\partial^2 \gamma}{\partial^2 x}$$

- ◆ GND的空间非均匀分布；
- ◆ 反映的是应变的二阶梯度效应；
- ◆ 内禀材料参数为位错平均自由程。

- 1. 晶体塑性理论基础**
- 2. 本构理论**
- 3. 晶体塑性理论的有限元实现**
 - 3.1 ABAQUS的UMAT**
 - 3.2 DAMASK**
- 4. 应用案例**

3.1 ABAQUS的UMAT



UMAT的概念及目的

UMAT全称User Defined Material Subroutine。为法国达索SIMULIA公司开发的有限元软件ABAQUS的自定义用户子程序。

目的：允许用户自定义材料的本构关系，并将材料属性赋予ABAQUS中的任何单元。

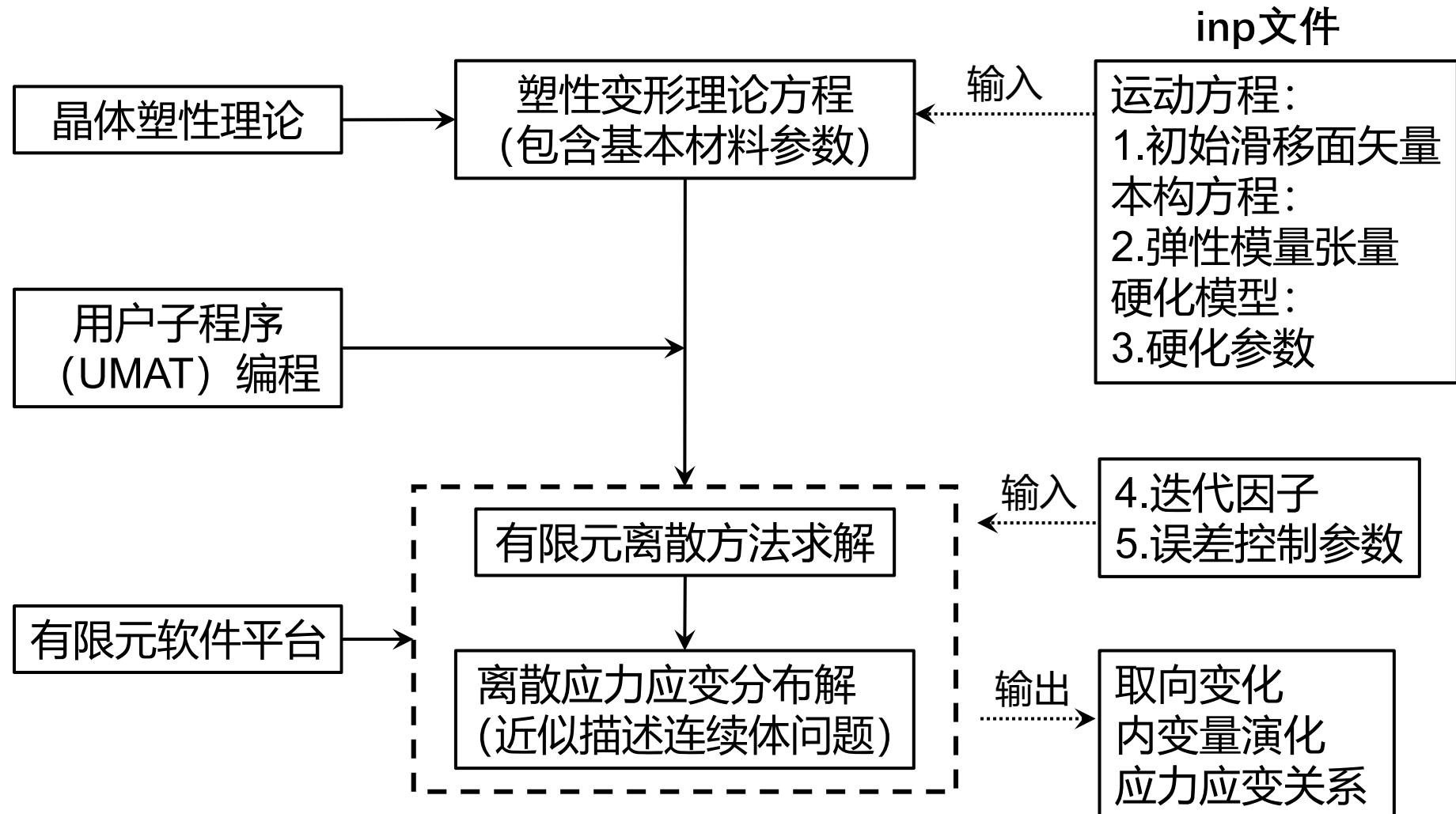
UMAT基本任务：



3.1 ABAQUS的UMAT



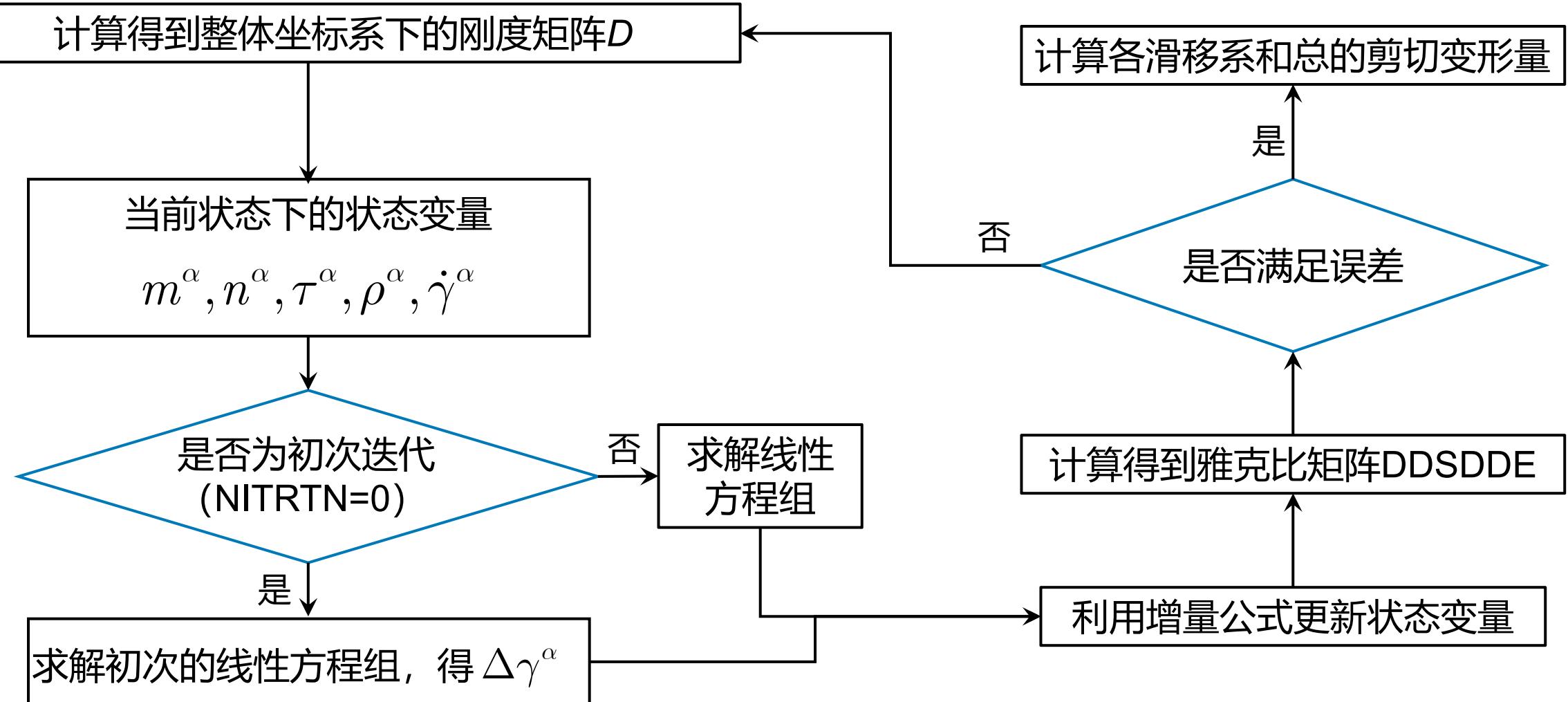
UMAT的建立与调用



3.1 ABAQUS的UMAT



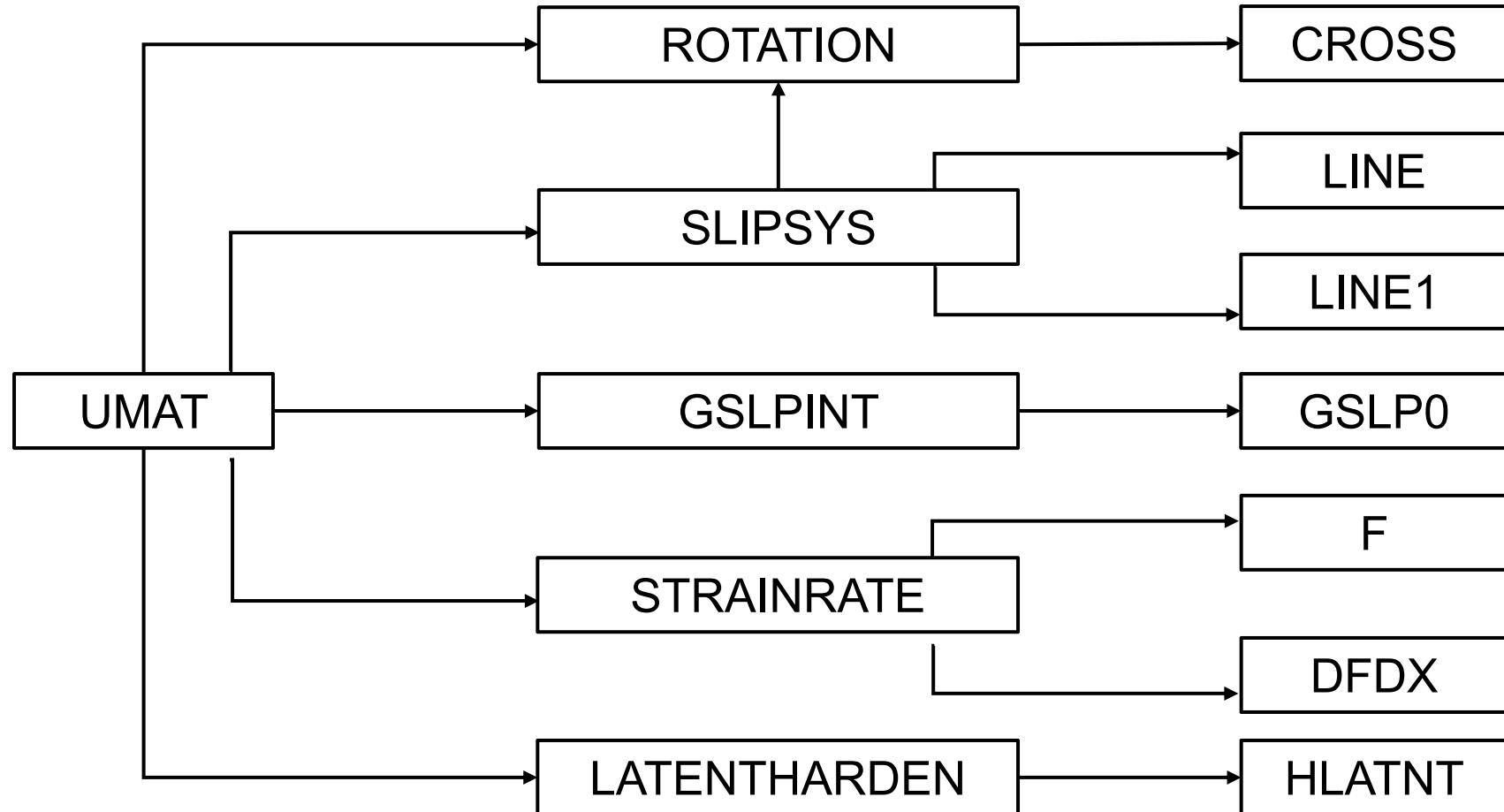
UMAT算法流程



3.1 ABAQUS的UMAT



经典晶体塑性用户子程序组成



3.1 ABAQUS的UMAT



UMAT基本格式

```
SUBROUTINE UMAT(stress,statev,ddsdde,sse,spd,scd,  
1 rpl, ddsdde, drplde, drpldt,  
2 stran,dstran,time,dtime,temp,dtemp,predef,dpred,cmname,  
3 ndi,nshrn,ntens,nstatv,props,nprops,coords,drot,pnewdt,  
4 celent,dfgrd0,dfgrd1,noel,npt,layer,kspt,kstep,kinc)
```

Part I

PARAMETER (ND=150)

```
include 'aba_param.inc'
```

CHARACTER*8 CMNAME

EXTERNAL F

Part II

```
dimension stress(ntens),statev(nstatv),  
1 ddsdde(ntens,ntens),ddsdde(ntens,ntens),drplde(ntens),  
2 stran(ntens),dstran(ntens),time(2),predef(1),dpred(1),  
3 props(nprops),coords(3),drot(3,3),dfgrd0(3,3),dfgrd1(3,3)
```

```
DIMENSION ISPDIR(3), ISP NOR(3), NSLIP(3),  
2 SLPDIR(3,ND), SLPNOR(3,ND), SLPDEF(6,ND),  
3 SLPSPN(3,ND), DSPDIR(3,ND), DSPNOR(3,ND),  
4 DLOCAL(6,6), D(6,6), ROTD(6,6), ROTATE(3,3),  
5 FSLIP(ND), DFDXSP(ND), DDEMMSD(6,ND),  
6 H(ND,ND), DDGDDE(ND,6),  
7 DSTRES(6), DELATS(6), DSPIN(3), DVGRAD(3,3),  
8 DGAMMA(ND), DTAUASP(ND), DGSLIP(ND), DROU(ND),  
9 WORKST(ND,ND), INDX(ND), TERM(3,3), TRM0(3,3), ITRM(3)
```

Part III

```
DIMENSION FSLIP1(ND), STRES1(6), GAMMA1(ND), TAUSP1(ND), ROU1(ND),  
2 GSLP1(ND), SPNOR1(3,ND), SPD1R(3,ND), DDSDE1(6,6),  
3 DSOLD(6), DGAMOD(ND), DTAUOD(ND), DGSPOD(ND),  
4 DSPNRO(3,ND), DSPDRO(3,ND), DROUD(ND),  
5 DHGDG(ND,ND)
```

3.1 ABAQUS的UMAT



UMAT变量定义

在UMAT中变量一般按照如下顺序定义

C	Array STATEV:			
C	STATEV (1)	-	STATEV(NSLPTL)	: current strength in slip systems g^α
C	STATEV (NSLPTL+1)	-	STATEV(2*NSLPTL)	: shear strain in slip systems γ^α
C	STATEV (2*NSLPTL+1)	-	STATEV(3*NSLPTL)	: resolved shear stress in slip systems τ^α
C	STATEV (3*NSLPTL+1)	-	STATEV(6*NSLPTL)	: normals to slip planes m^α
C	STATEV (6*NSLPTL+1)	-	STATEV(9*NSLPTL)	: slip directions n^α
C	STATEV (9*NSLPTL+1)			: total cumulative shear strain γ

其中NSLPIT数量根据开动滑移系定义

	FCC	BCC	HCP
滑移系	{111} <110>	{110} {112} {123} <111>	{1010} {1011} {0001} <11\bar{2}0>
NSLPTL	12	12~48	3或6

3.1 ABAQUS的UMAT

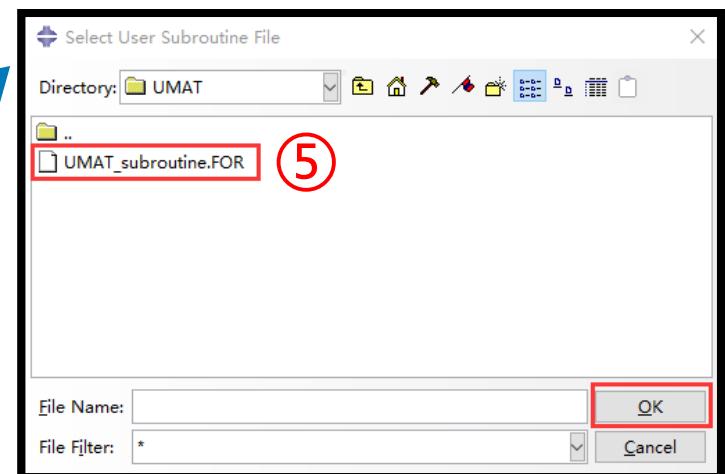
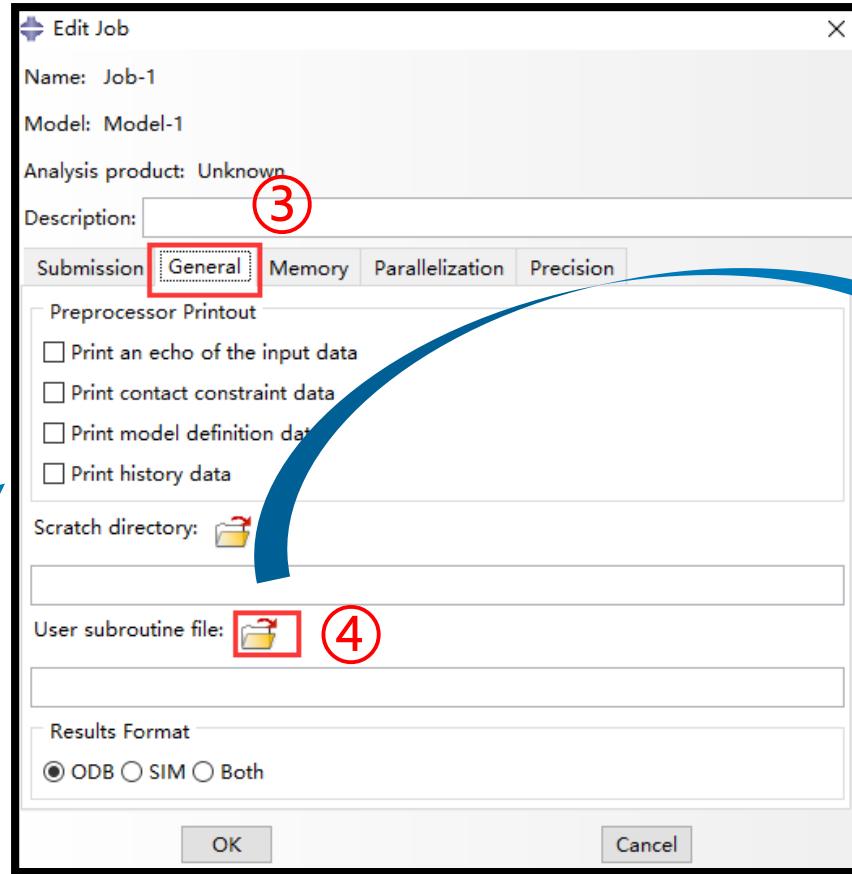
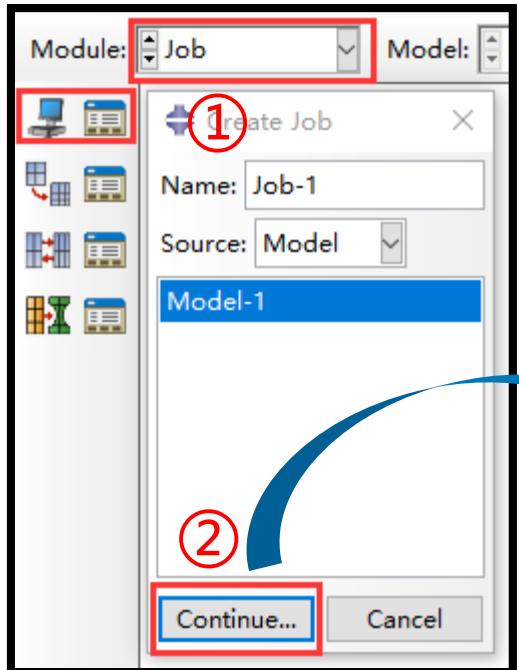


通过inp文件定义材料参数

C_{11}	168.4 GPa	*User Material, constants=160, unsymm 168400., 121400., 75400., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. -1., 0., 1., 0.15494224, 0.79638060, 0.58461173, 0., 0. 0., 1., 0., 0.76056994, 0.28150499, -0.58505414, 0., 0. 10., 0.001, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
C_{12}	121.4 GPa	0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 1., 1., 1., 1., 1., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. -1., 0., 1., 0.15494224, 0.79638060, 0.58461173, 0., 0. 0., 1., 0., 0.76056994, 0.28150499, -0.58505414, 0., 0. 10., 0.001, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
C_{44}	75.4 GPa	0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. -1., 0., 1., 0.15494224, 0.79638060, 0.58461173, 0., 0. 0., 1., 0., 0.76056994, 0.28150499, -0.58505414, 0., 0. 10., 0.001, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
n	10	0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 541.5, 109.5, 60.8, 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 1., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 10., 1e-05, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
q	1	0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 541.5, 109.5, 60.8, 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 1., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 10., 1e-05, 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
$\dot{\gamma}_0^\alpha$	0.001	0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
h_0	541.5 MPa	0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 0.5, 1., 0., 0., 0., 0., 0., 0., 0. 1., 10., 1e-05, 0., 0., 0., 0., 0., 0.								
		**								
τ_s	109.5 MPa	晶体类型 FCC BCC HCP								
τ_0	60.8 MPa	所需弹性常数 C_{11}, C_{12}, C_{44} C_{11}, C_{12}, C_{44} $C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}$								

3.1 ABAQUS的UMAT

UMAT的接口调用



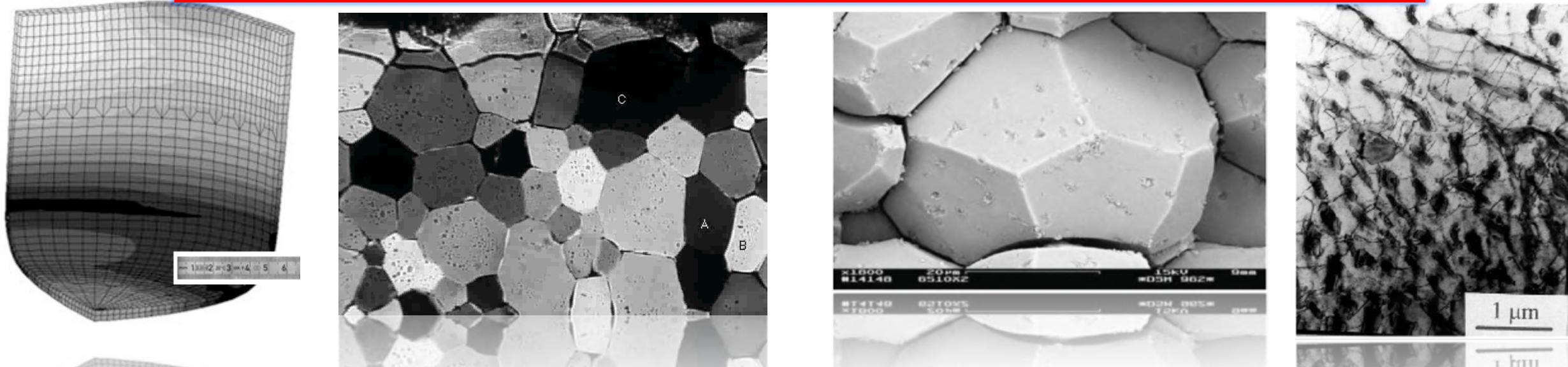


Düsseldorf Advanced Material Simulation Kit: DAMASK



F. Roters, P. Eisenlohr, M. Diehl, P. Shanthraj, C. Reuber, D. Raabe

晶体塑性是一个复杂的多尺度问题，DAMASK是研究晶体塑性的一个多尺度平台

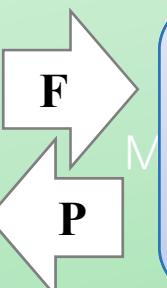


材料点模型

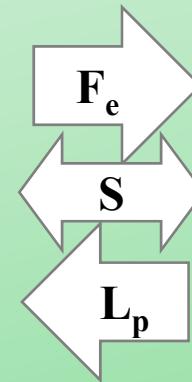
基本问题满足：
• 平衡方程
• 几何相容



塑性变形
&
均匀化处理



微晶弹塑性



本构方程：
• 弹性响应
• 塑性响应



近20年的发展历程

- 55人/年的专业工作量
- 50.000行代码
- 集成的预处理和后处理
- 大量的用户群体



Abaqus



Marc

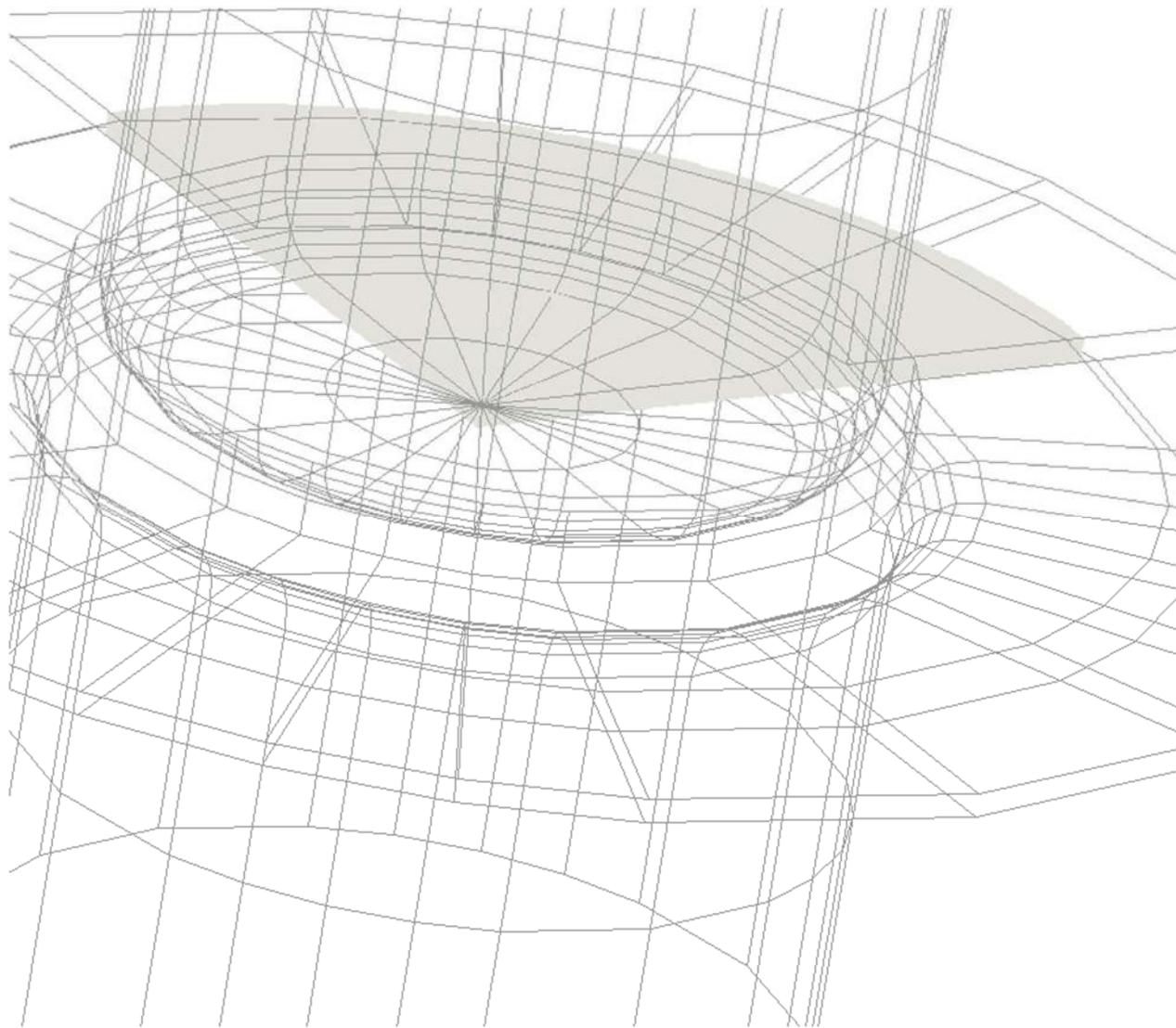


FFT

- ✓ 灵活的晶体塑性框架
- ✓ 多个塑性本构准则
- ✓ 集成了商用有限元求解器：Abaqus & Marc
- ✓ 集成了快速高效存储的谱求解器：Spectral

➤ 扩展到多场求解

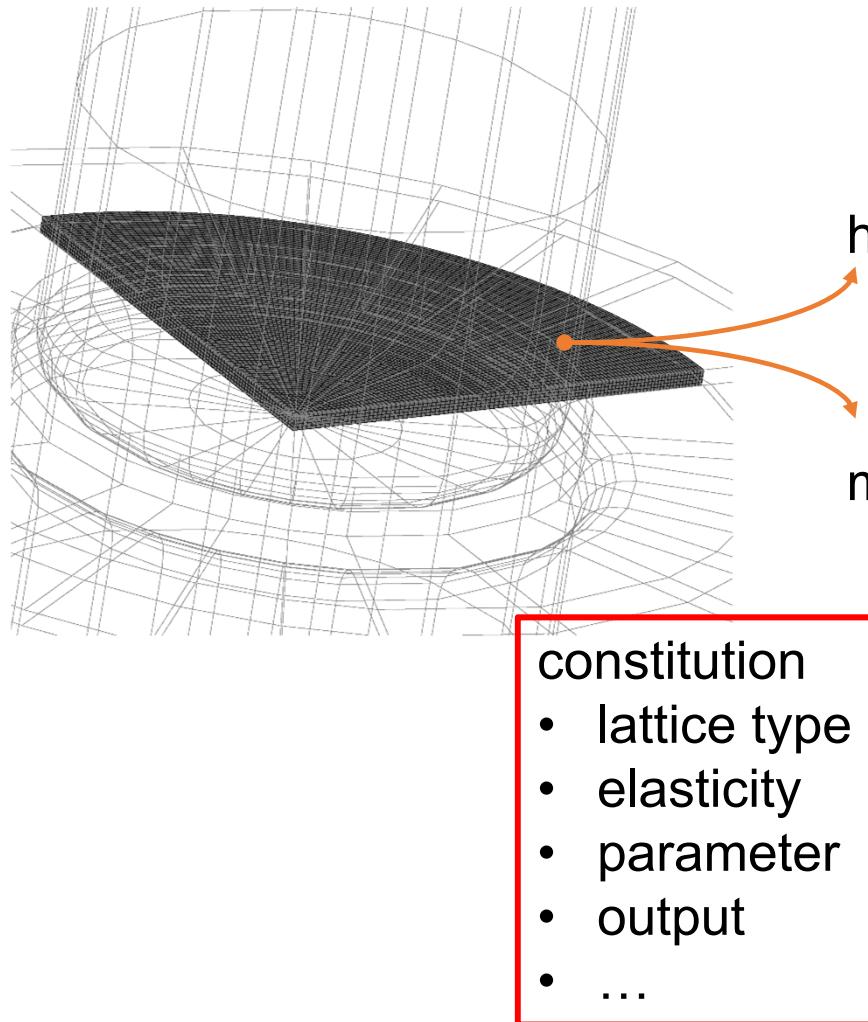
- 温度场
- 损伤
- 扩散
- 相场



塑性本构准则

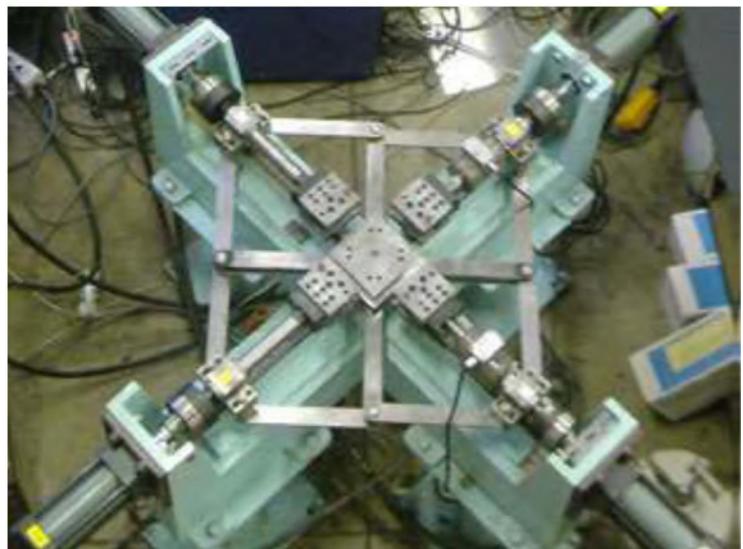
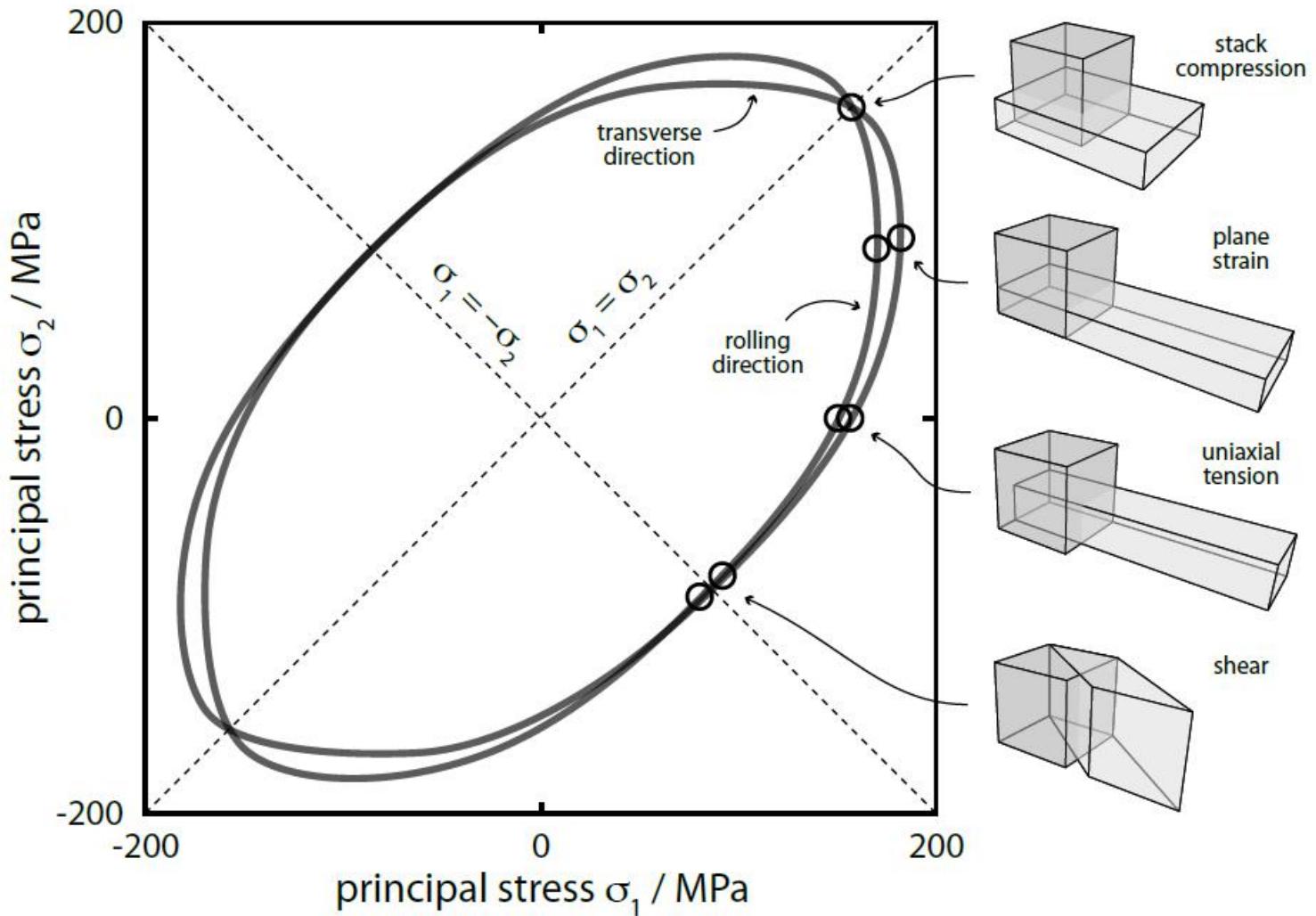
- 各向同性塑性准则 (J2)
- 幂律塑性模型
- 基于位错密度塑性模型
 - 变形孪晶、相变
- 应变梯度塑性模型 (non-local)
- ...

3.2 DAMASK



```
<texture>  
  
[SX]  
(gauss)    phi1 0.000 Phi 0.000 phi2      0.000  
scatter     0.000      fraction 1.000  
  
[random]  
  
[Rolling]  
hybridIA   DP_EBSD.linearODF  
symmetry   orthotropic # or monoclinic  
  
...
```

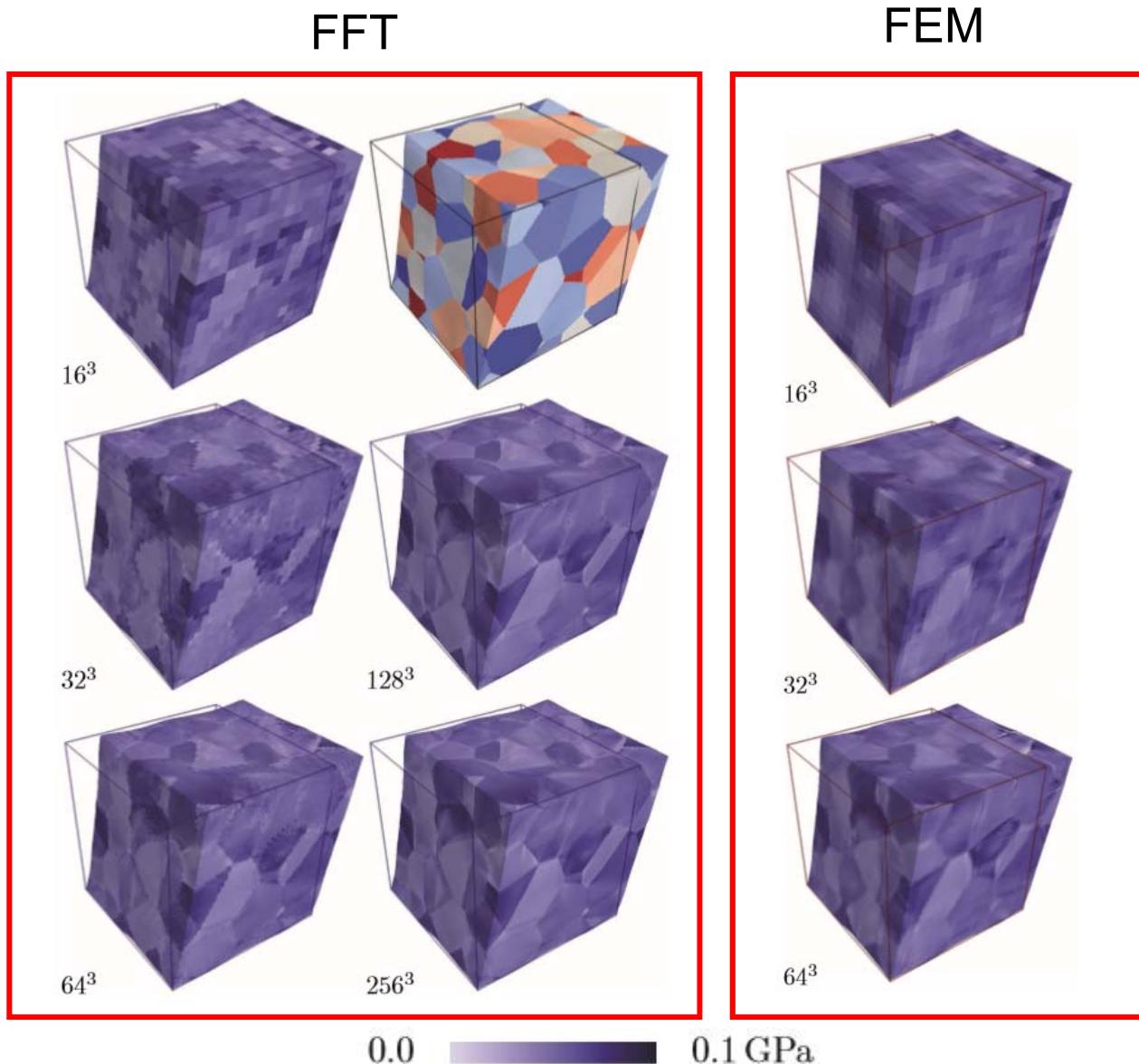
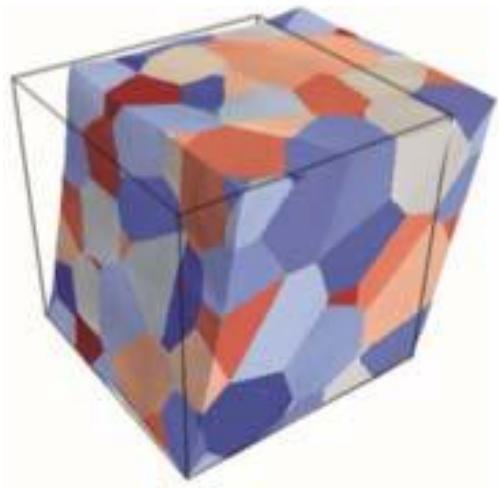
3.2 DAMASK



3.2 DAMASK

对比: FEM VS FFT

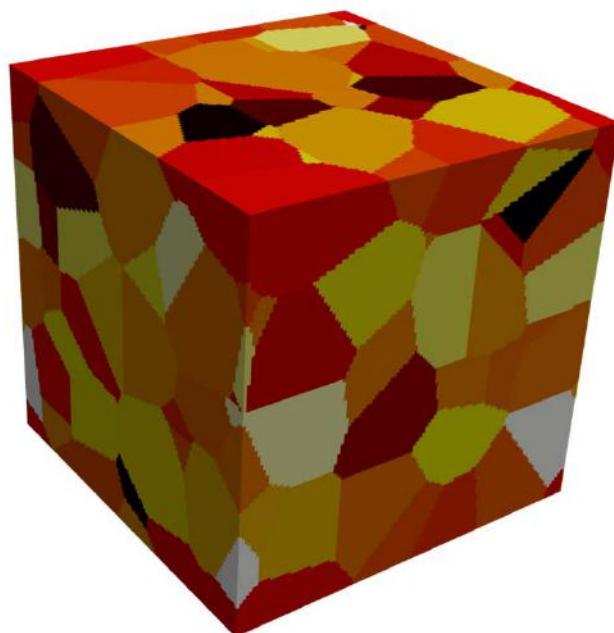
simple shear



3.2 DAMASK

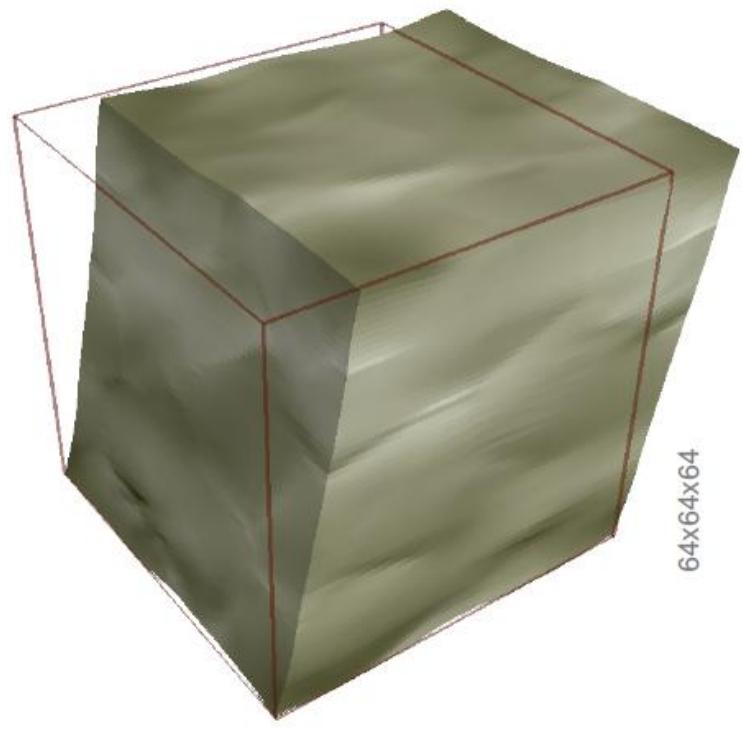
对比: FEM VS FFT

RVE: 随机取向的100晶粒

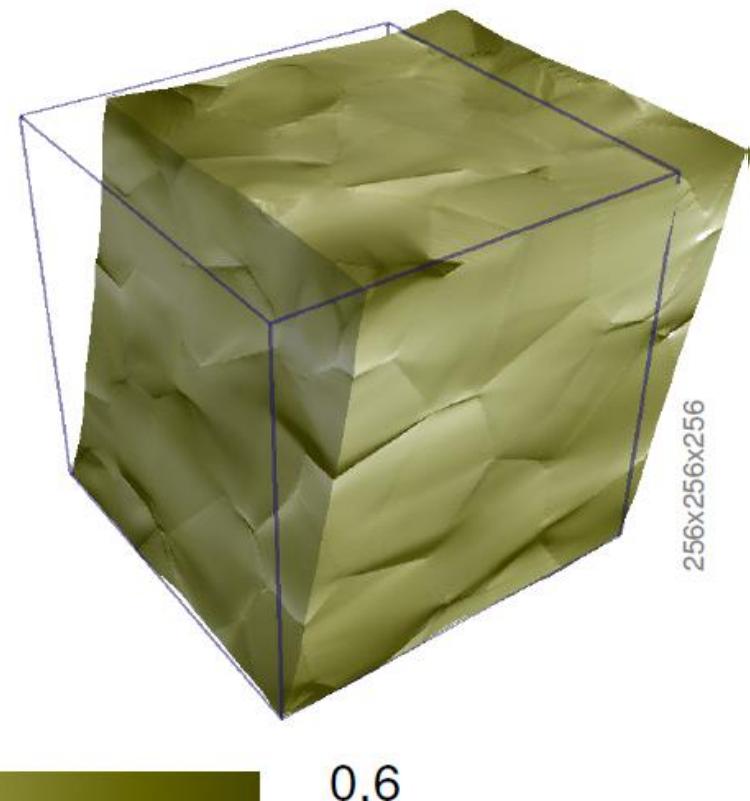


simple shear

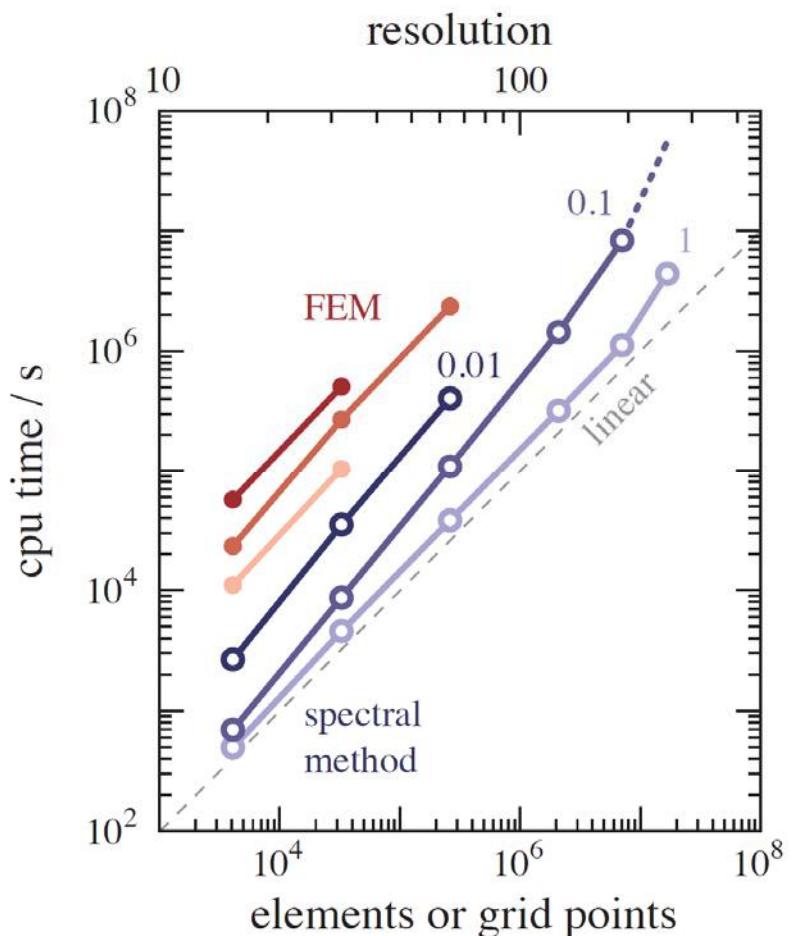
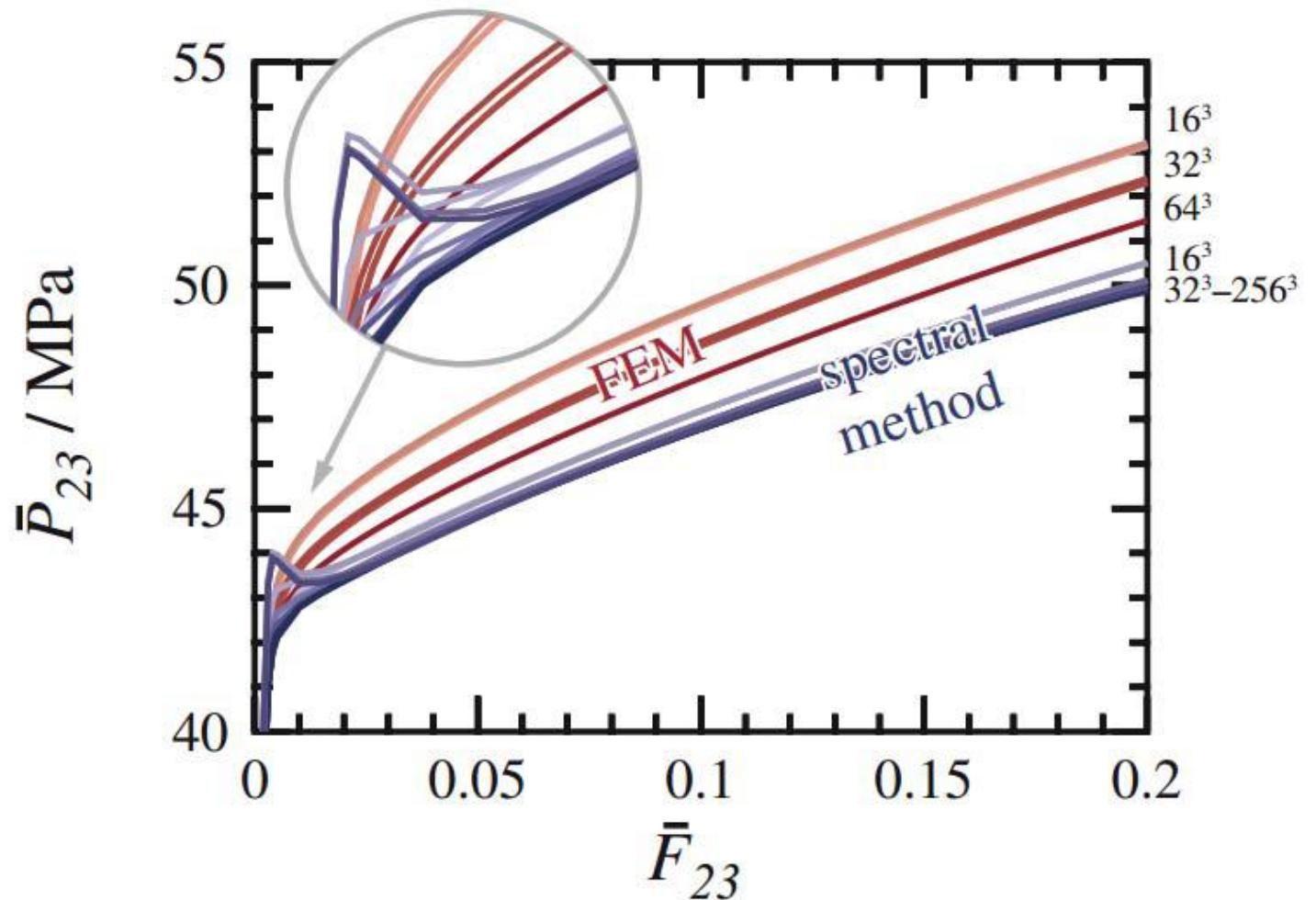
Finite Element Method



Spectral Method



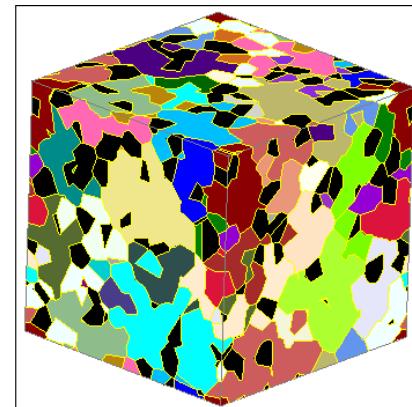
3.2 DAMASK



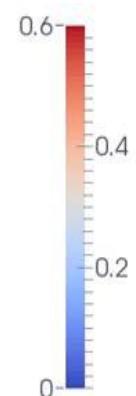
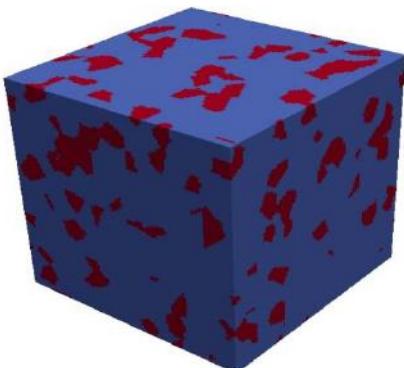
3.2 DAMASK

双相材料在23%应变下的单轴变形晶体塑性模拟

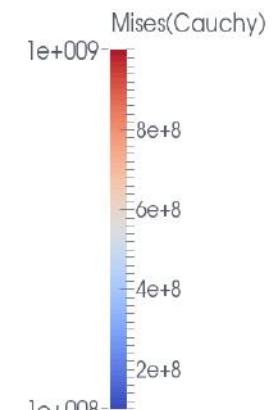
Microstructure input



Fourier grid



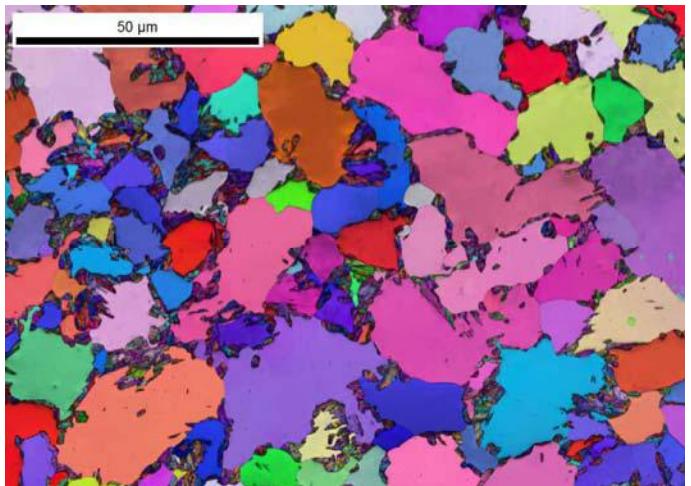
Strain distribution



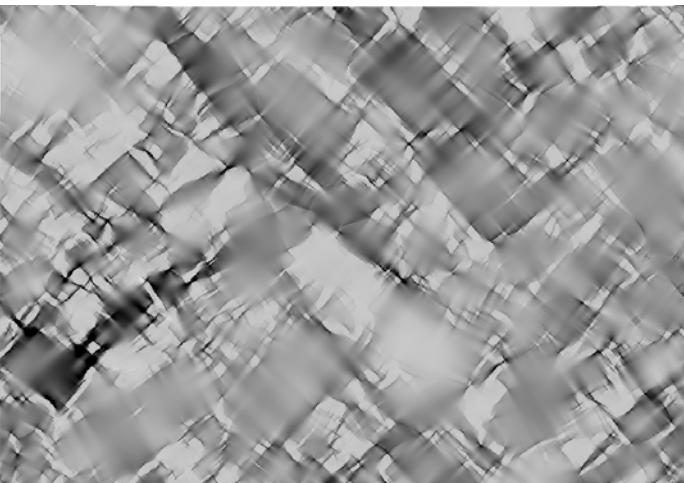
Stress distribution

3.2 DAMASK

$P_{11} @ \bar{F}_{11} = 1.01$



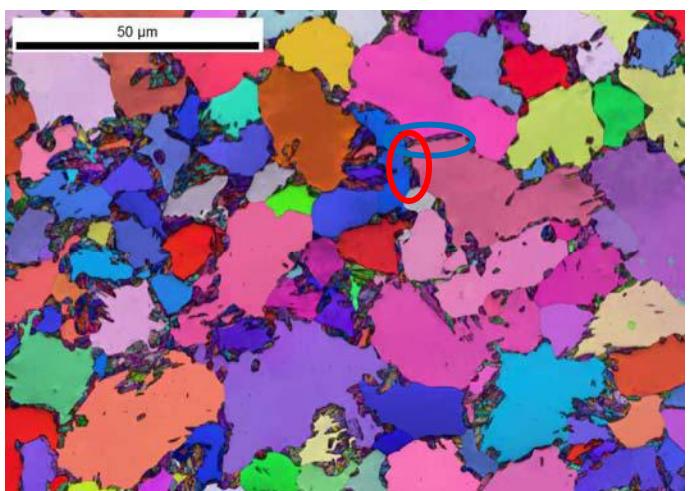
变形
云图



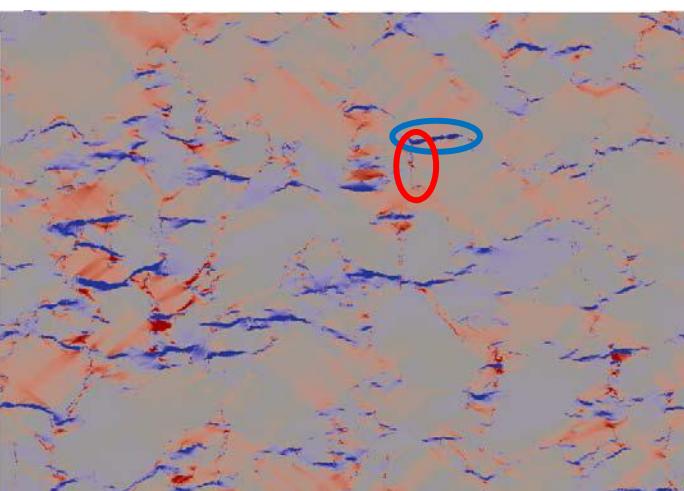
1.04



0.99



应力
云图

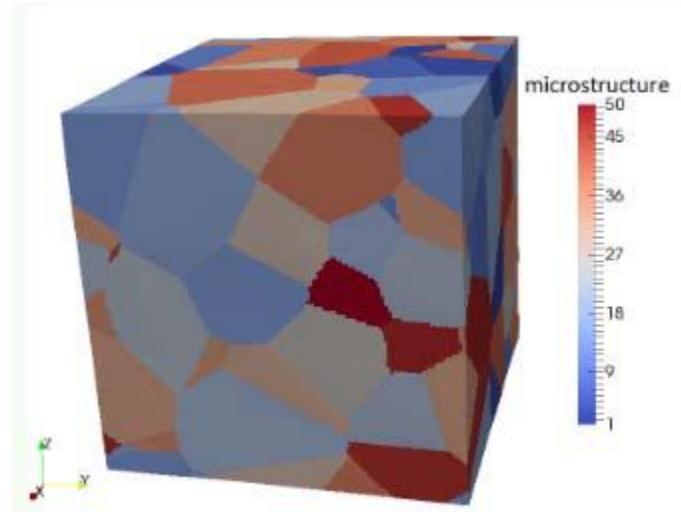


1040
390
MPa
-260

3.2 DAMASK

DAMASK: 实例

单晶取向对相邻晶粒应力和应变分布的影响



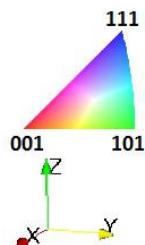
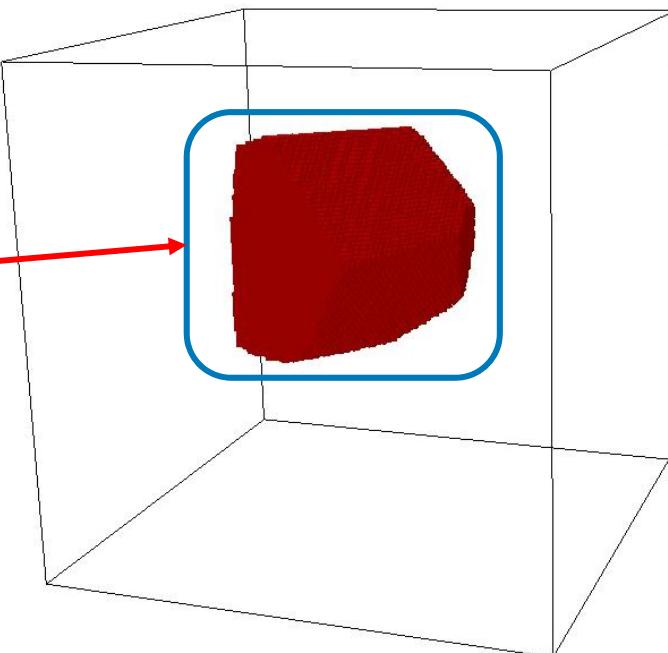
50 grains

$128 \times 128 \times 128$

变量: 参考晶粒取向

$$\begin{aligned}\phi_1 &= 10 \rightarrow 90 \\ \phi &= 0 \\ \phi_2 &= 0\end{aligned}$$

参考晶粒



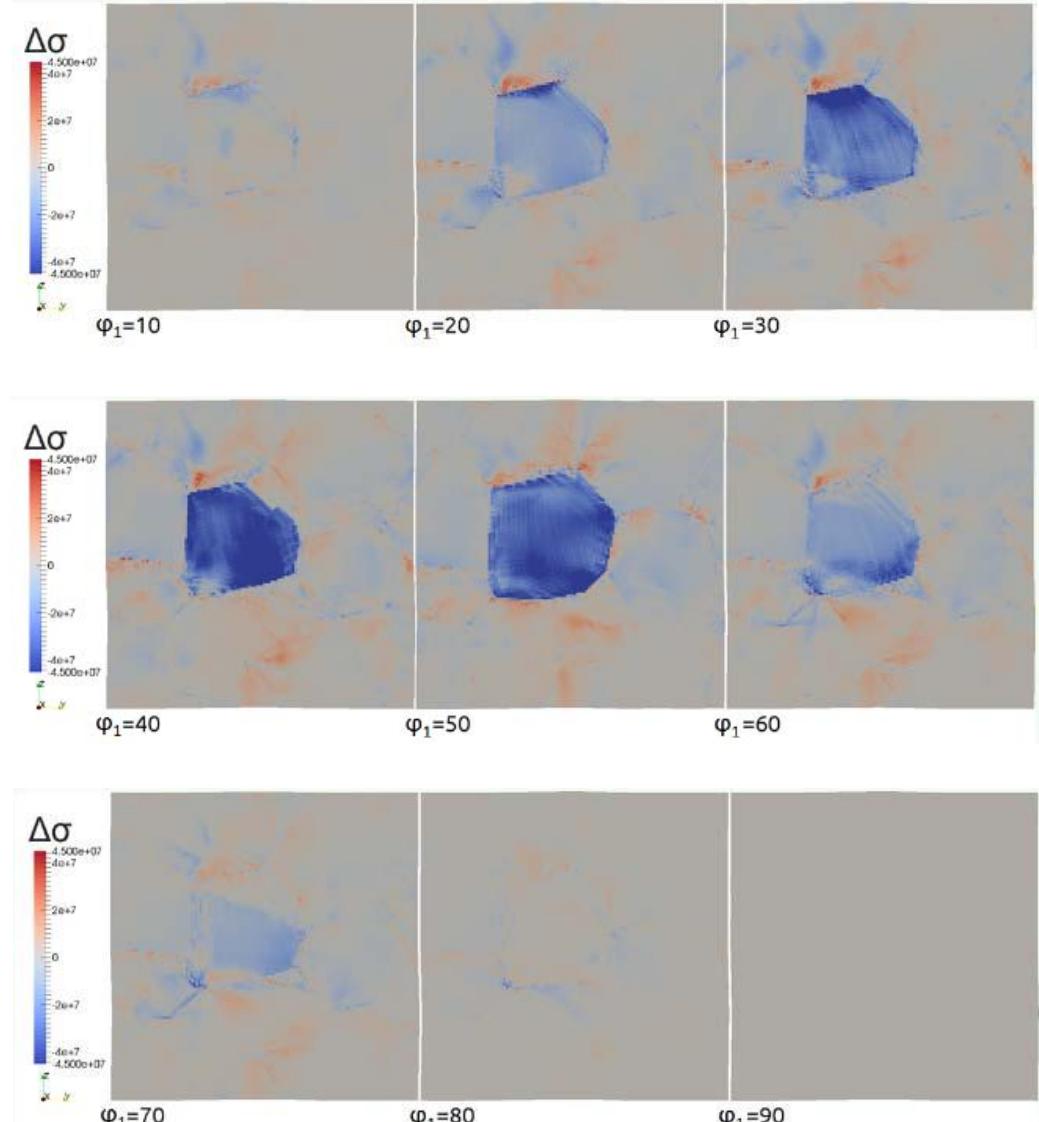
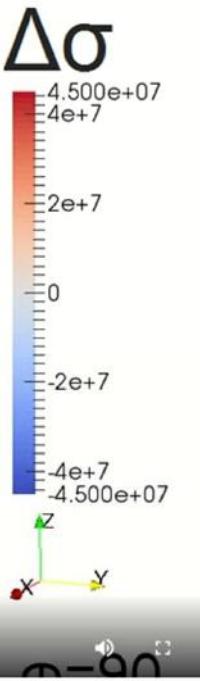
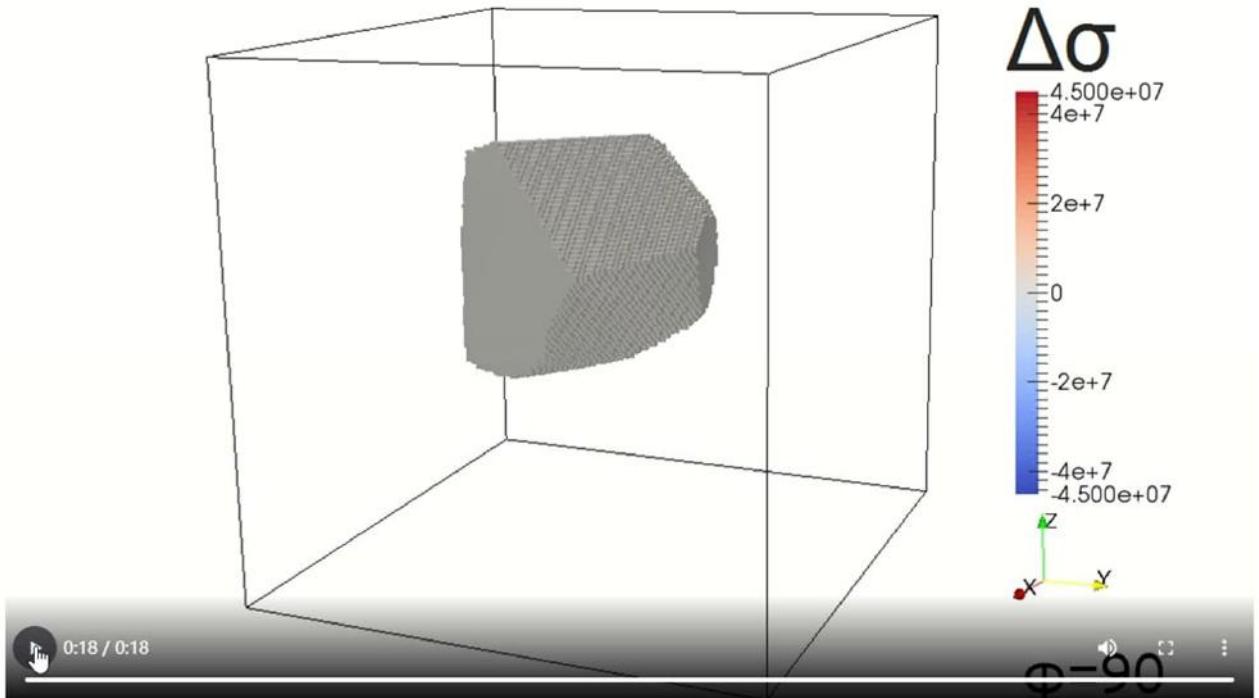
$\Phi = 00$

3.2 DAMASK

DAMASK: 实例



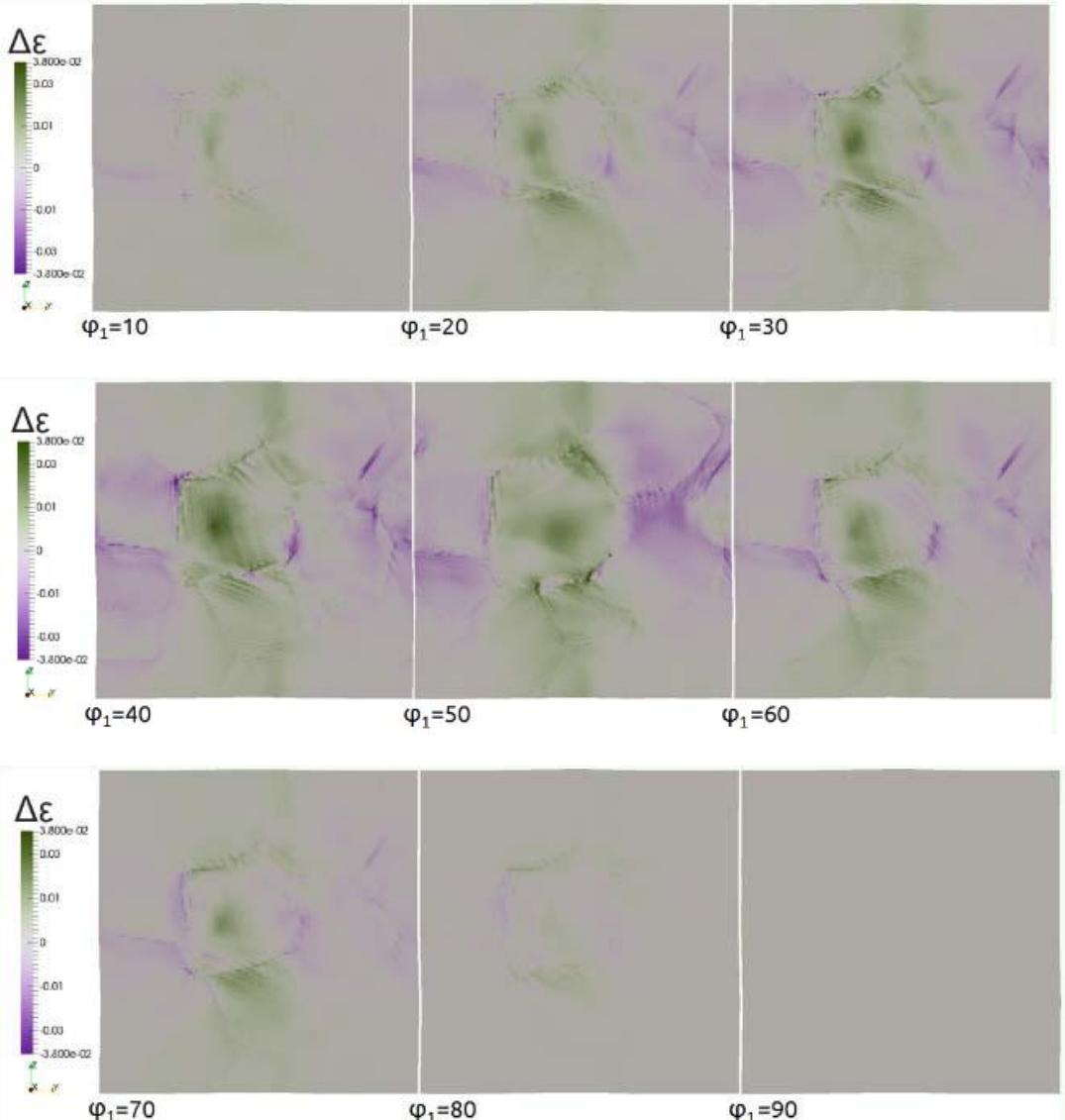
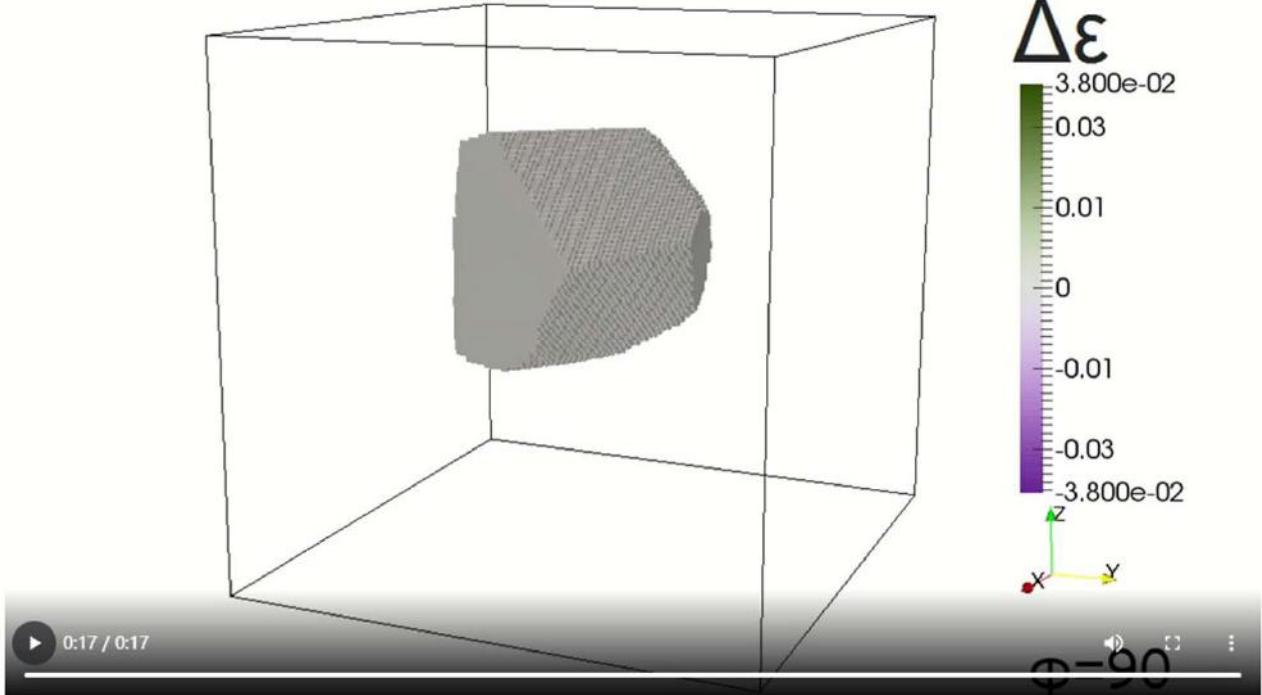
单晶取向对相邻晶粒应力和应变分布的影响



3.2 DAMASK

DAMASK: 实例

单晶取向对相邻晶粒应力和应变分布的影响



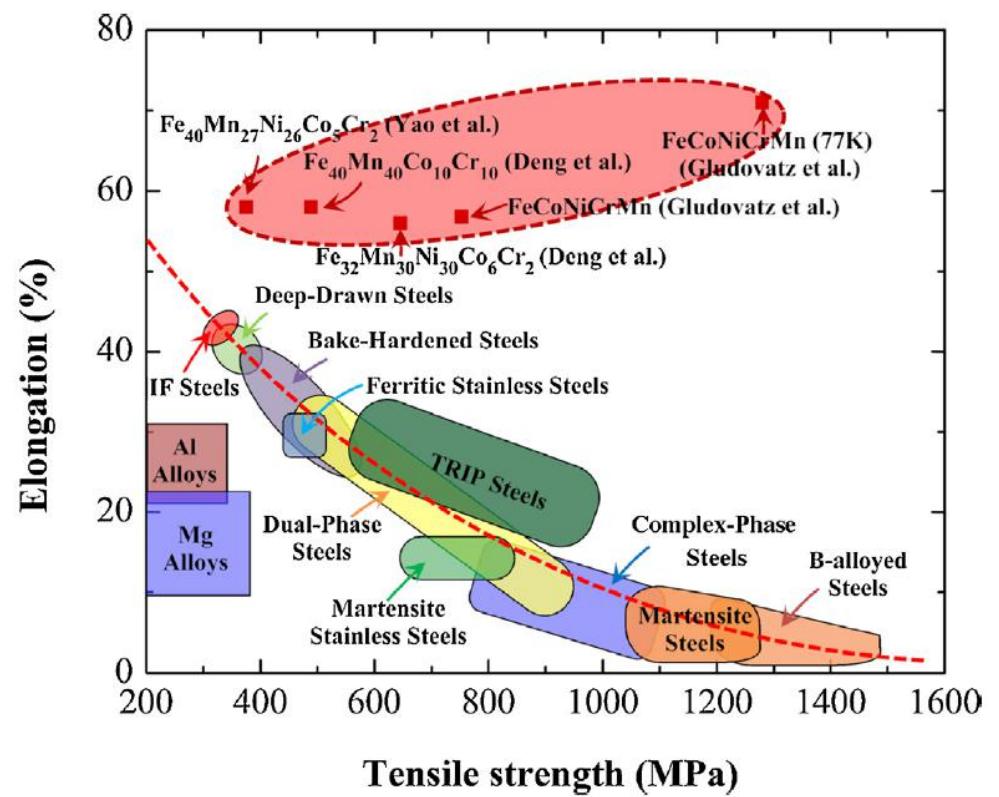
- 1. 晶体塑性理论基础**
- 2. 本构理论**
- 3. 晶体塑性理论的有限元实现**
- 4. 应用案例**
 - 4.1 高熵合金的循环塑性行为研究**
 - 4.2 梯度结构材料的强韧行为研究**
 - 4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为**

4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

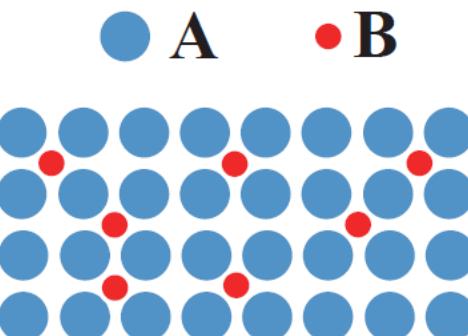


高熵合金简介

高熵合金(High-entropy alloys)简称HEA，是由五种或五种以上等量或大约等量金属形成的合金，具有优异的力学性能。

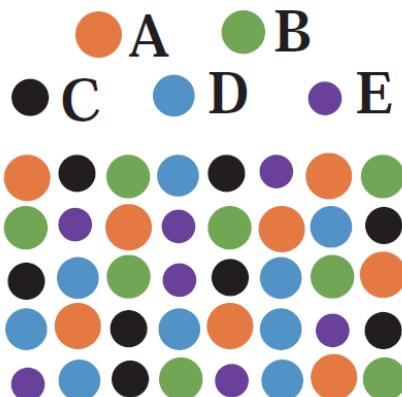


传统合金
1~2种主元元素



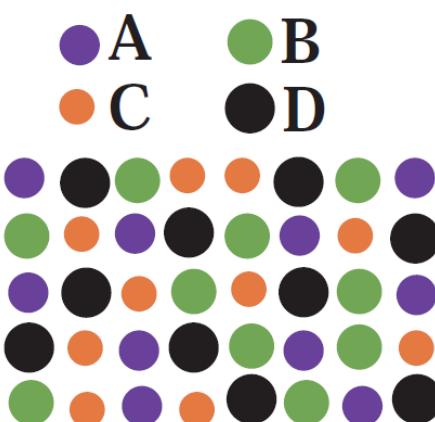
合金比纯金属性能更优

第一代高熵合金
至少5种主元元素
等原子比



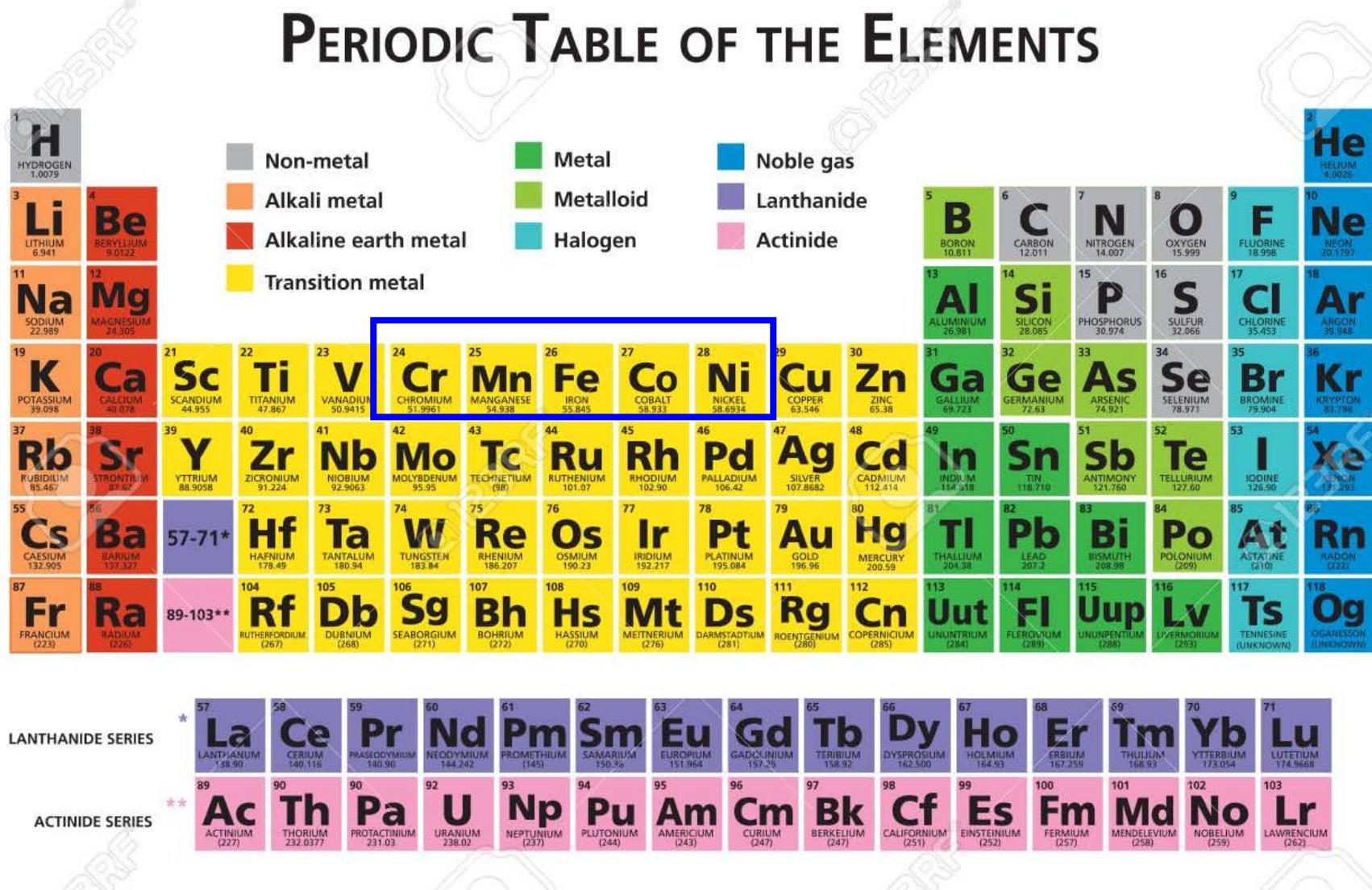
单相
稳态

第二代高熵合金
至少4种主元元素
非等原子比



双相或多相
亚稳态
含有间隙原子

4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

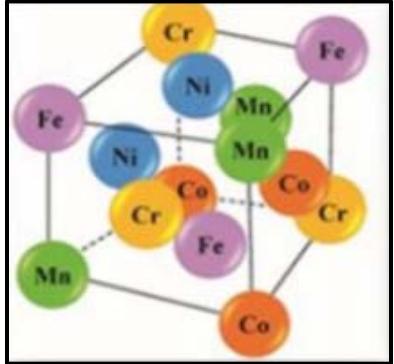


4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

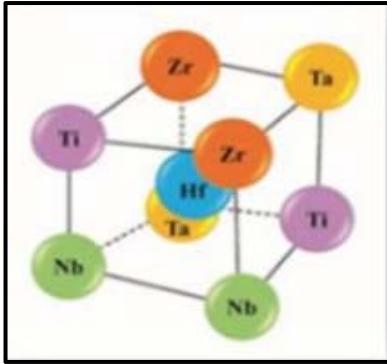
非等原子比高熵合金



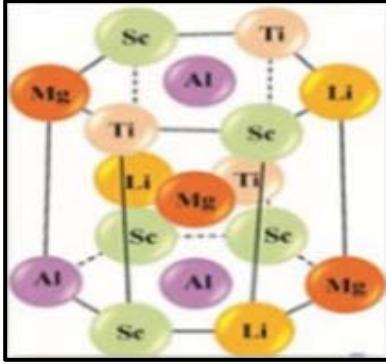
高熵合金也能形成简单的相结构



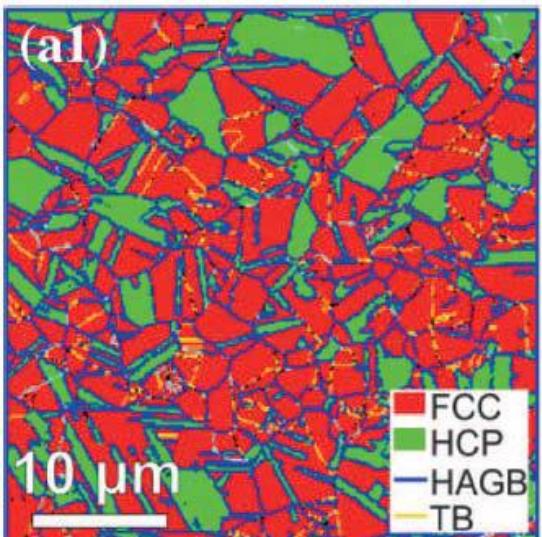
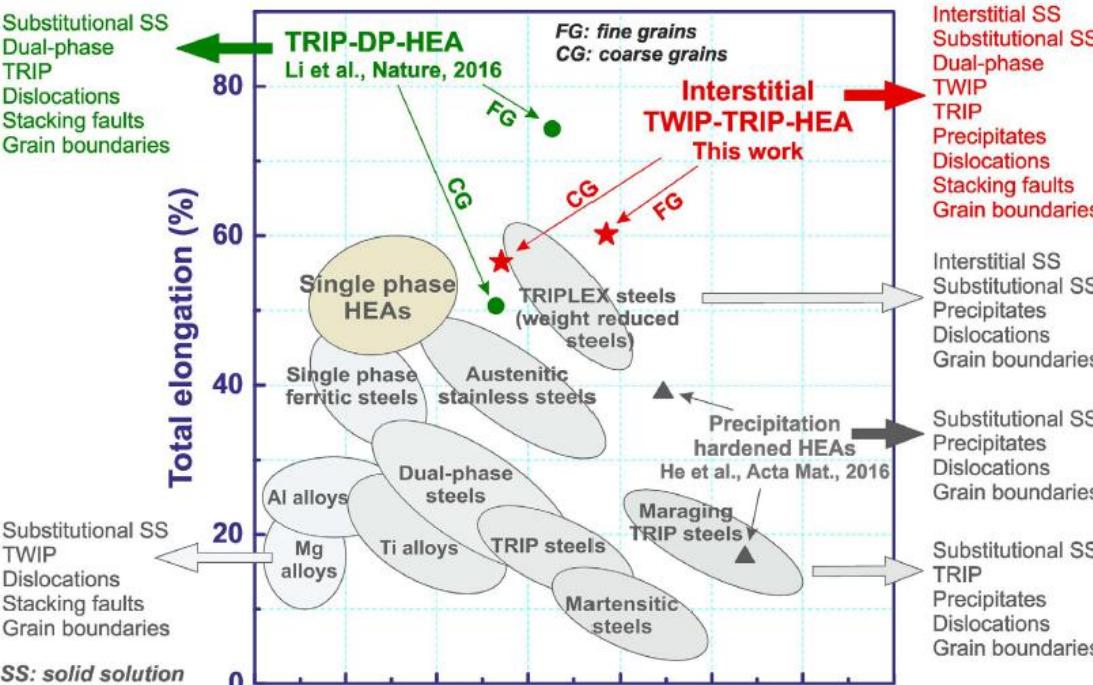
FCC结构



BCC结构



HCP结构



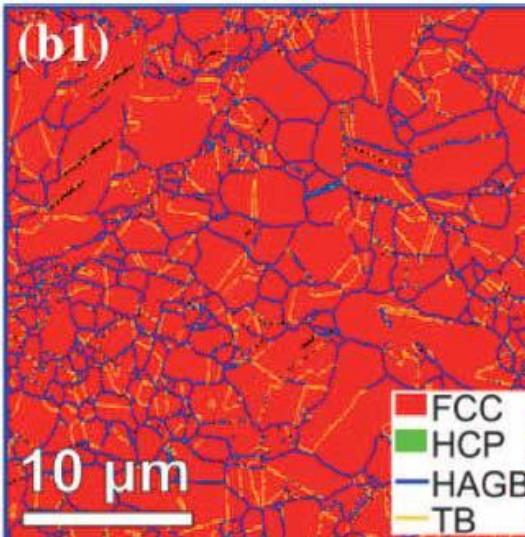
Fe₅₀Mn₃₀Co₁₀Cr₁₀
双相高熵合金

←

Fe_{49.5}Mn₃₀Co₁₀Cr₁₀C_{0.5}

→

单相高熵合金

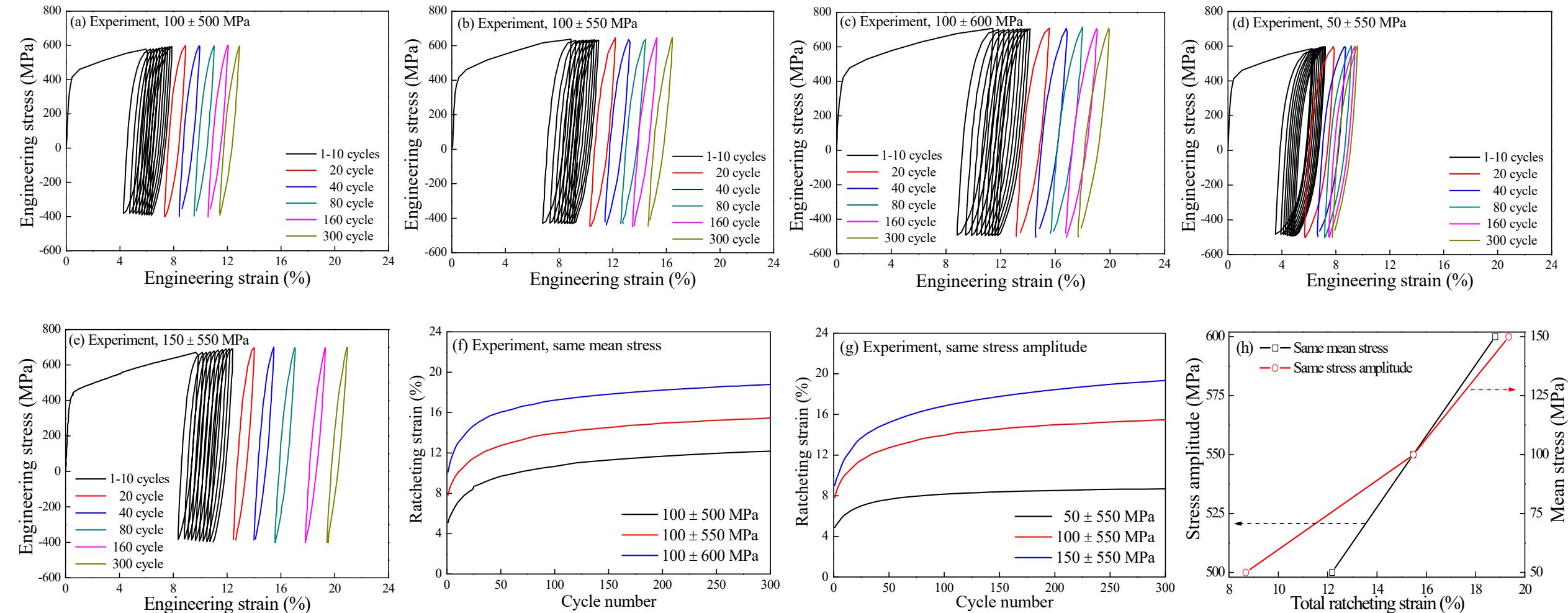


调整塑性变形机制和强化机制，是非等原子比高熵合金(NE-HEAs)向进一步强韧性匹配方向发展的关键途径。

4.1 高熵合金的循环塑性行为研究



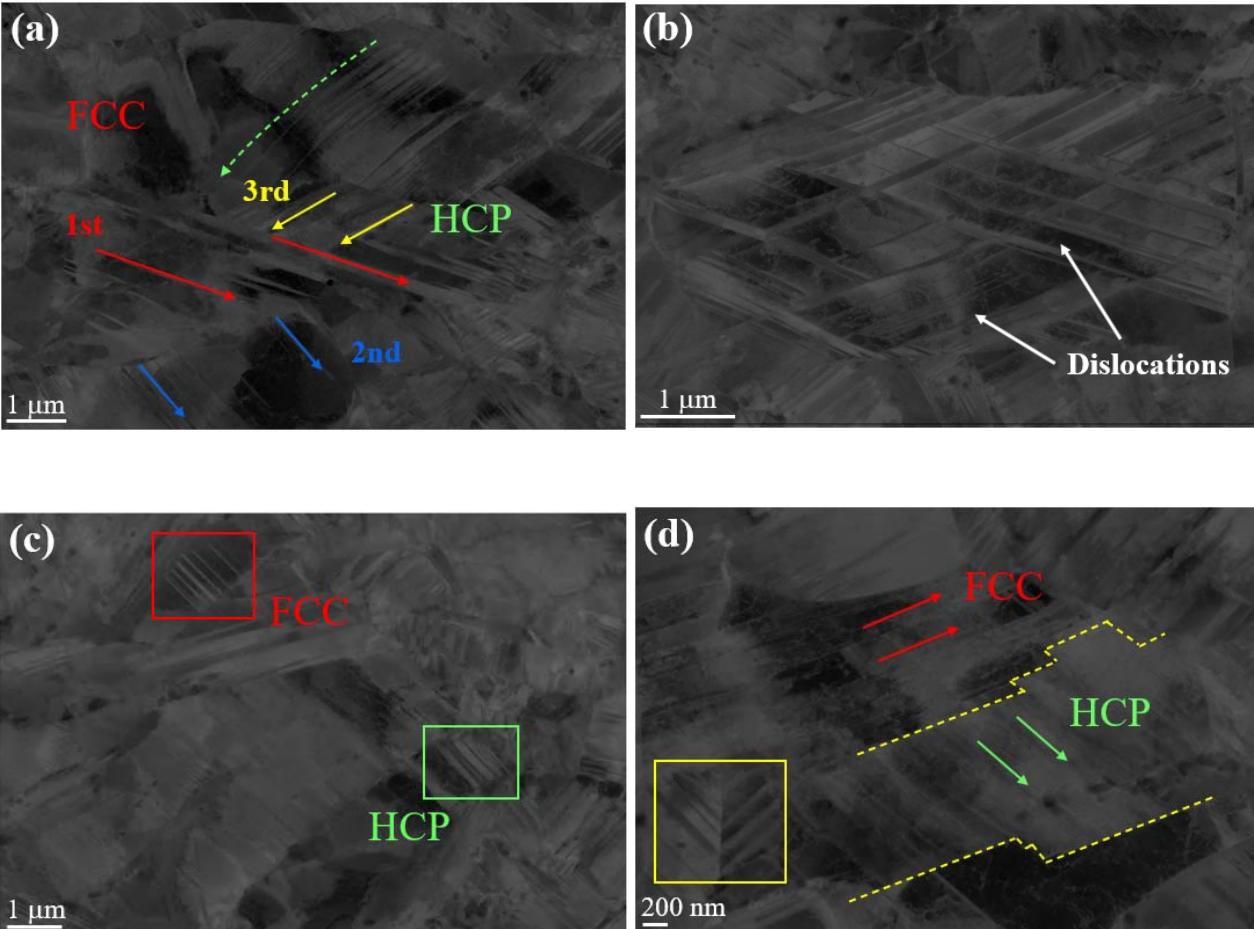
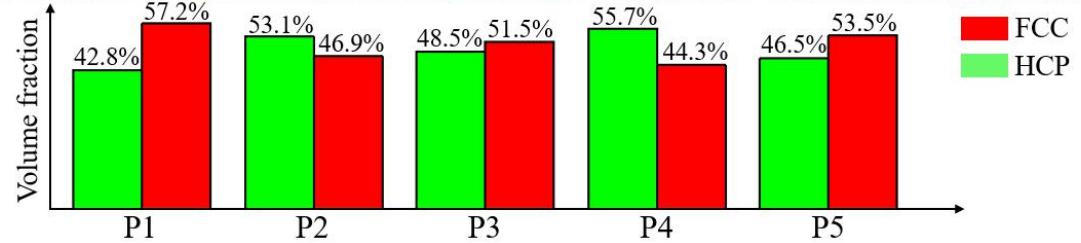
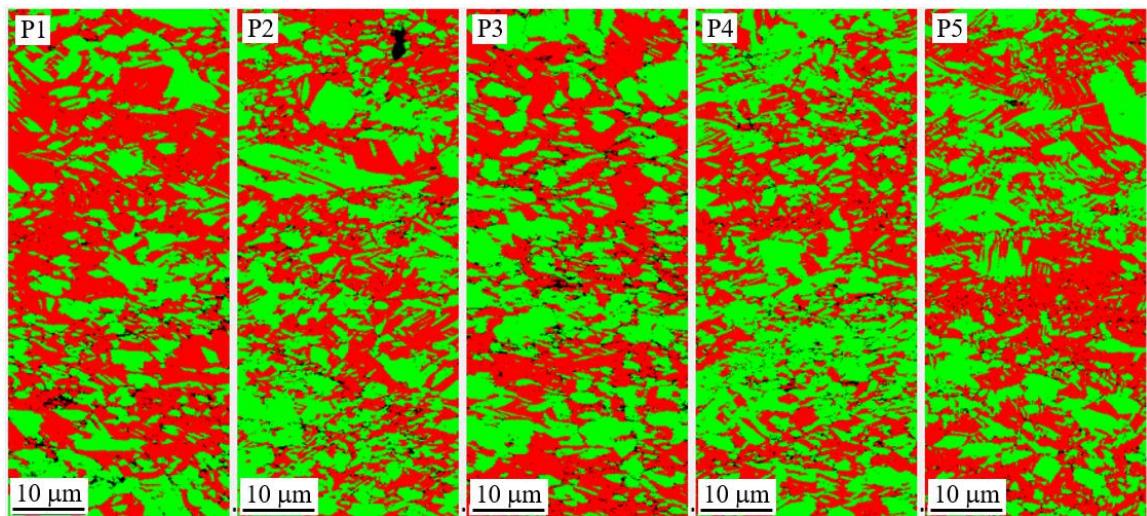
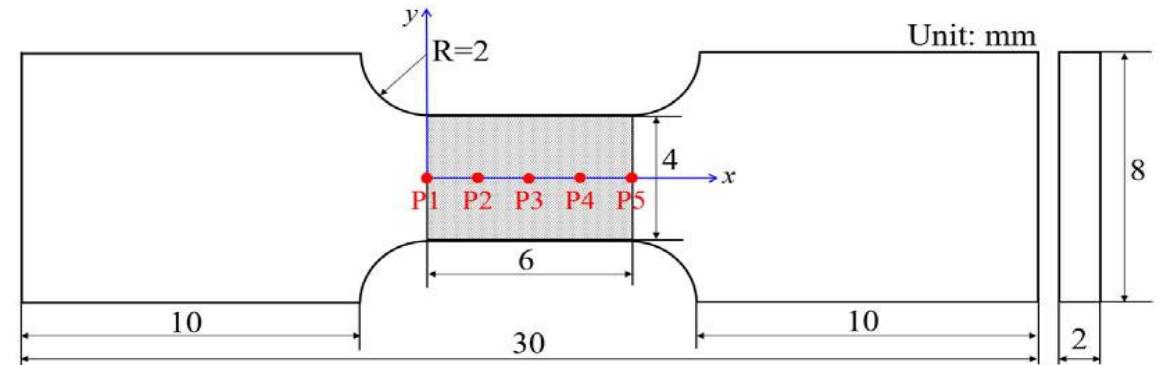
高熵合金的循环变形测试



$$\text{棘轮应变的定义: } \varepsilon_r = \frac{1}{2}(\varepsilon_{\max} + \varepsilon_{\min})$$

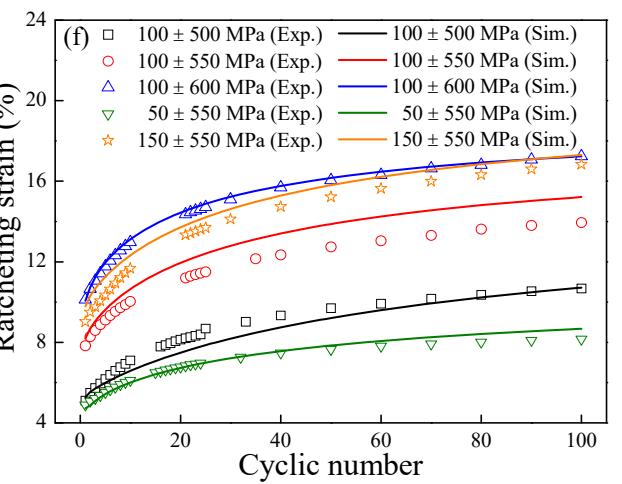
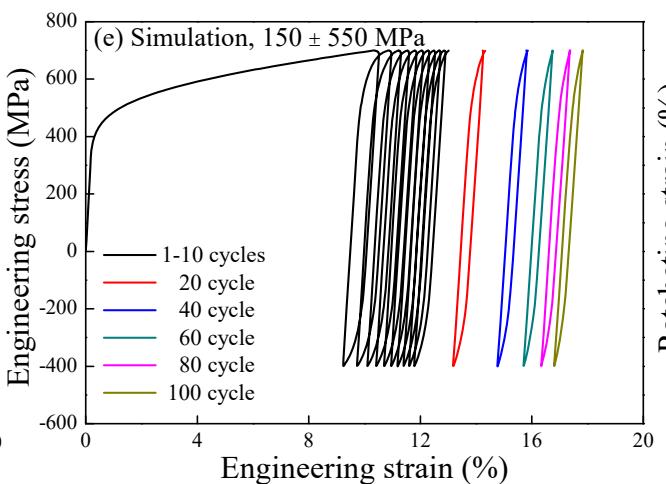
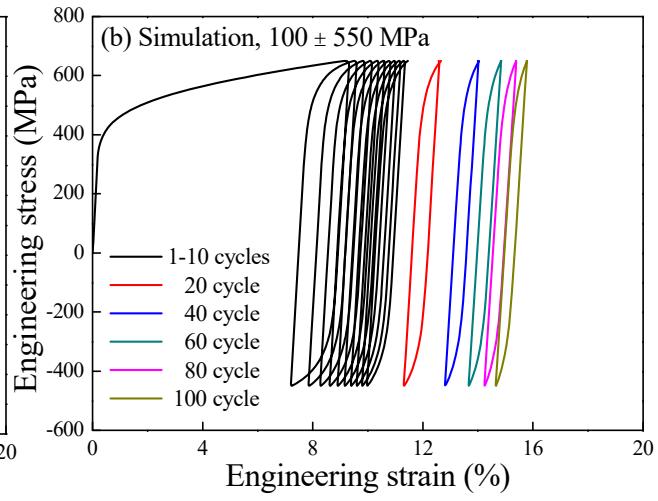
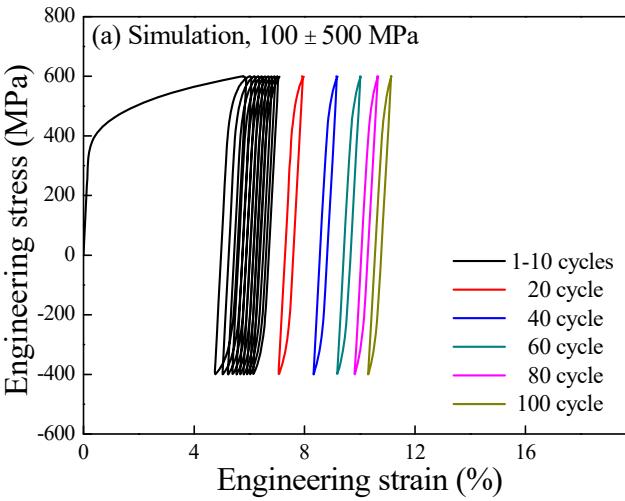
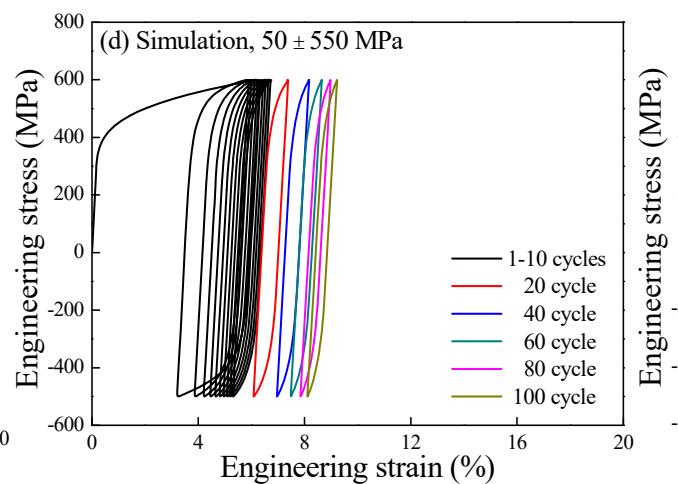
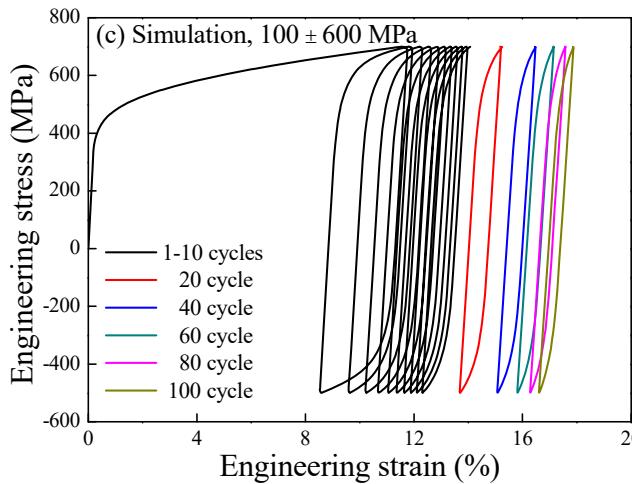
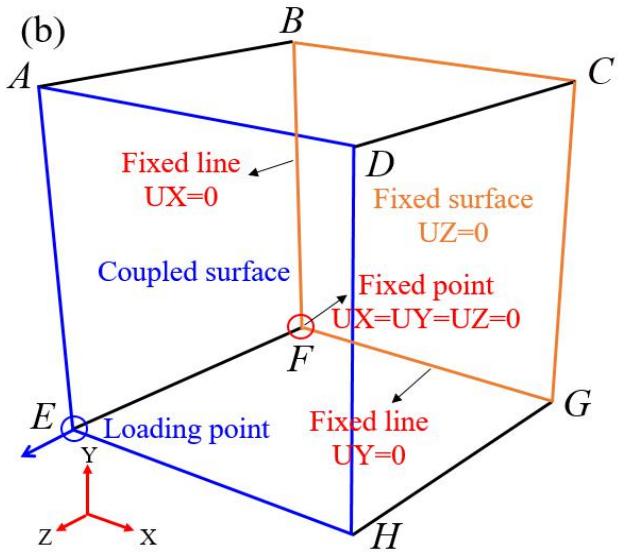
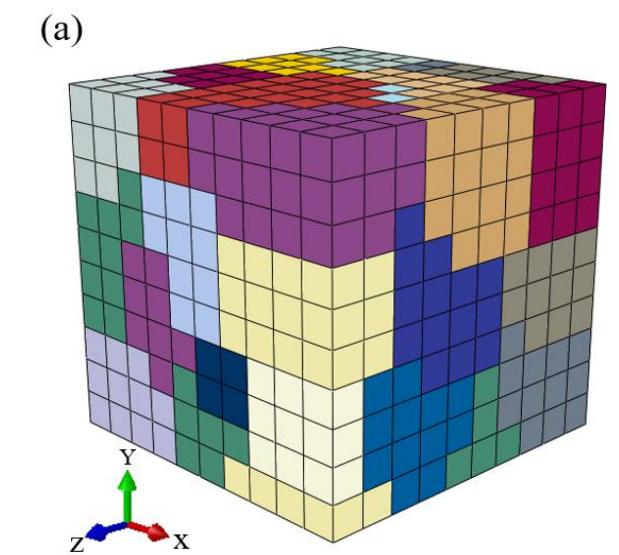
4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

变形后高熵合金的微观表征(EBSD/ECCI)



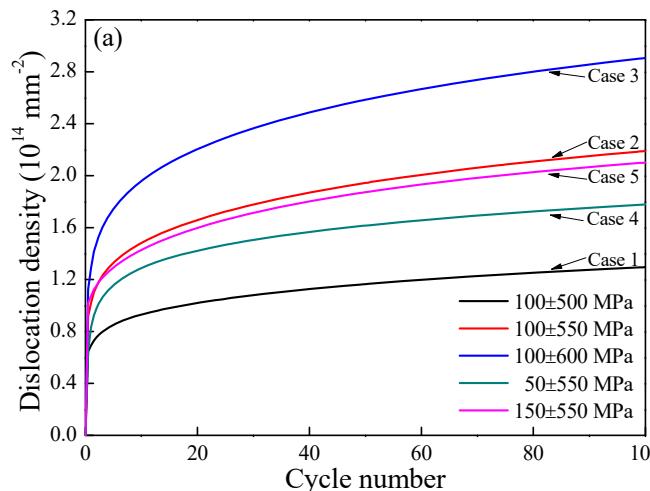
4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

高熵合金循环变形的晶体塑性模拟

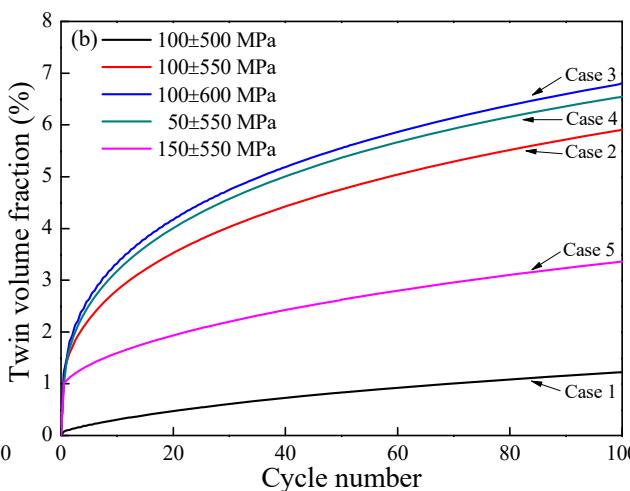


4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

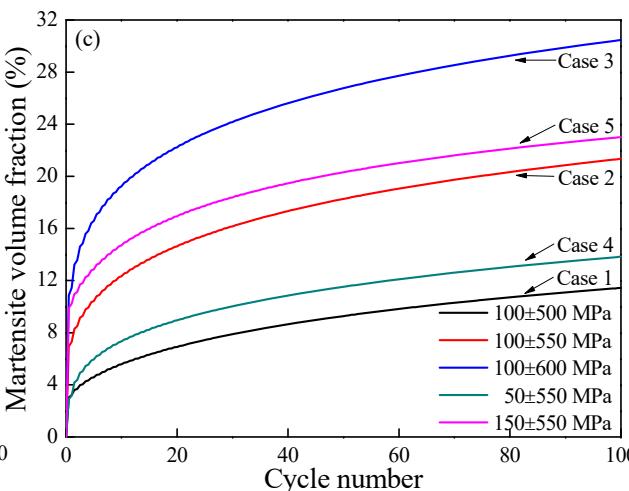
高熵合金循环变形的晶体塑性模拟



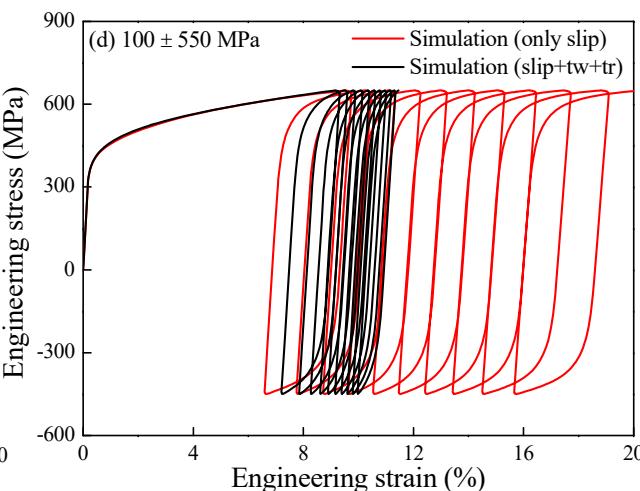
位错密度



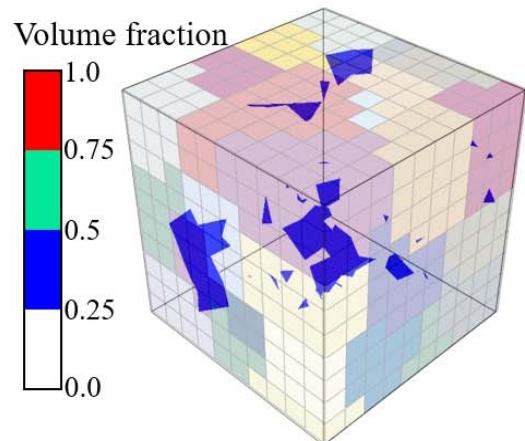
孪晶体积分数



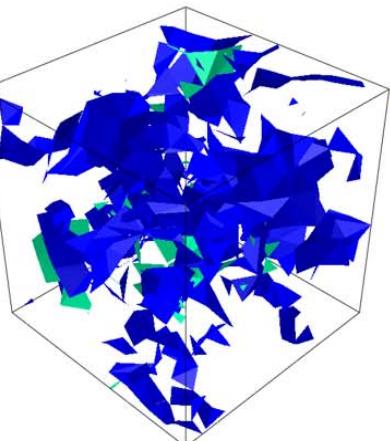
马氏体体积分数



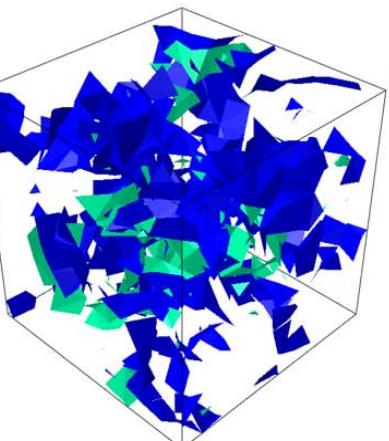
TRIP/TWIP效应
的贡献



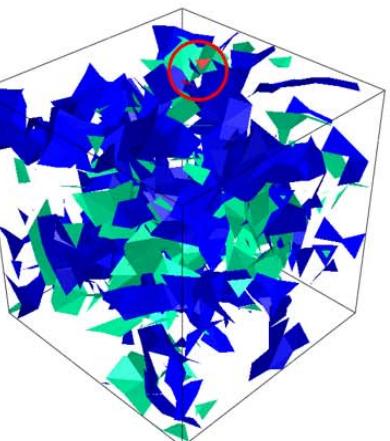
(a) 1 cycle



(b) 25 cycles



(c) 50 cycles



(d) 100 cycles

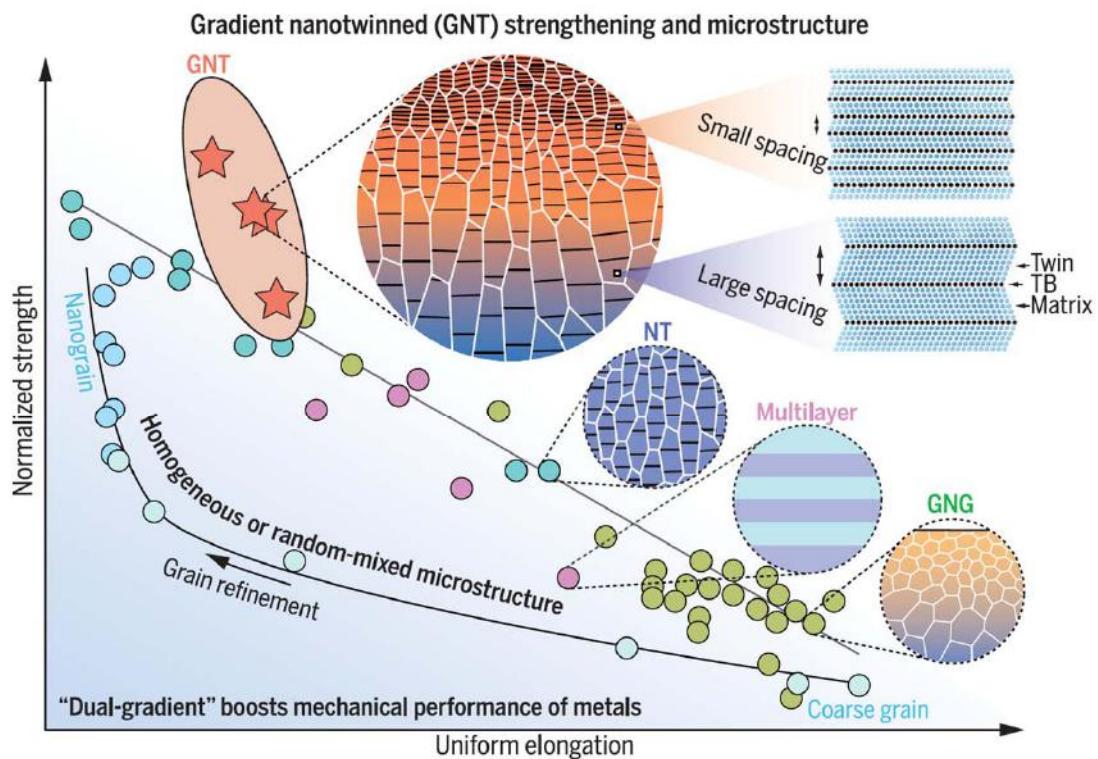
4.1 高熵合金的循环塑性行为研究

结论



1. $\text{Fe}_{49.5}\text{Mn}_{30}\text{Co}_{10}\text{Cr}_{10}\text{C}_{0.5}$ 高熵合金室温下可以同时激活多种强化机制和塑性变形机制。
2. 应力幅值和平均应力会对高熵合金的棘轮行为产生影响，这种影响是通过改变内部微结构的演化产生的。
3. 发展的晶体塑性本构模型可以很好地描述高熵合金的棘轮应变演化和微结构演化规律。
4. TRIP和TWIP效应可以有效地提高高熵合金的循环硬化能力，抑制棘轮应变的发展。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

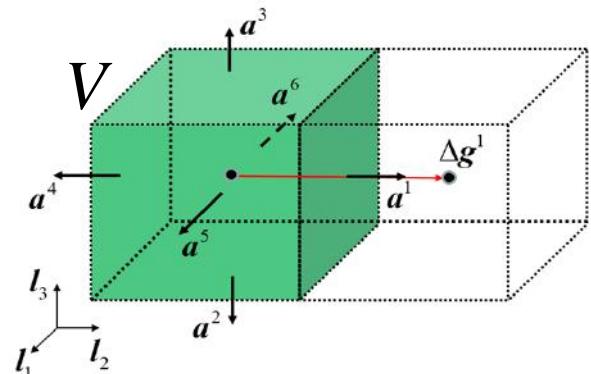


Highly tunable structural gradient for extra strengthening and ductility in metals.



4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

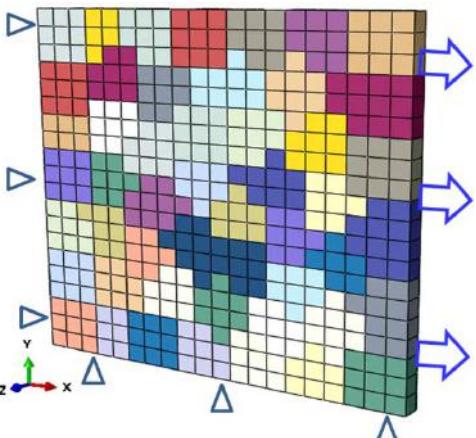
均匀材料的变形行为



位错运动速度上限

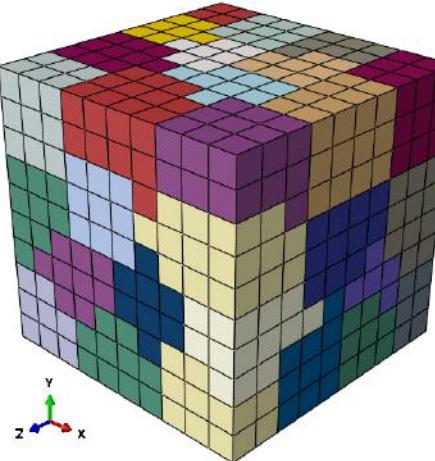
$$\hat{v} = \sqrt[3]{V / \Delta t}$$

单层模型



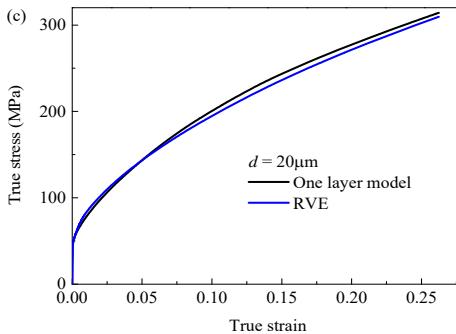
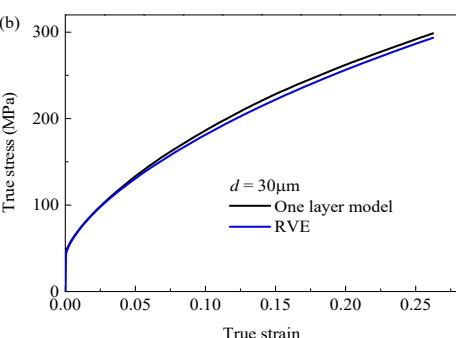
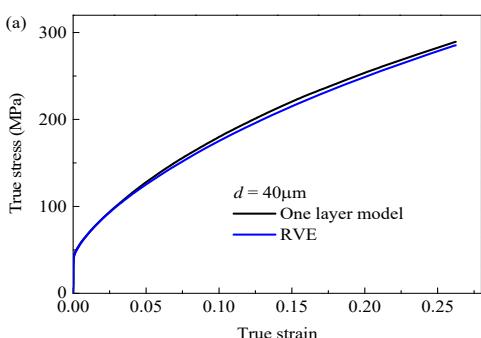
晶粒个数: 50
单元个数: 400 (C3D8)

代表性体积单元(RVE)



晶粒个数: 50
单元个数: 1000 (C3D8)

*x*方向单轴拉伸, 应变率 $6 \times 10^{-4} / s$

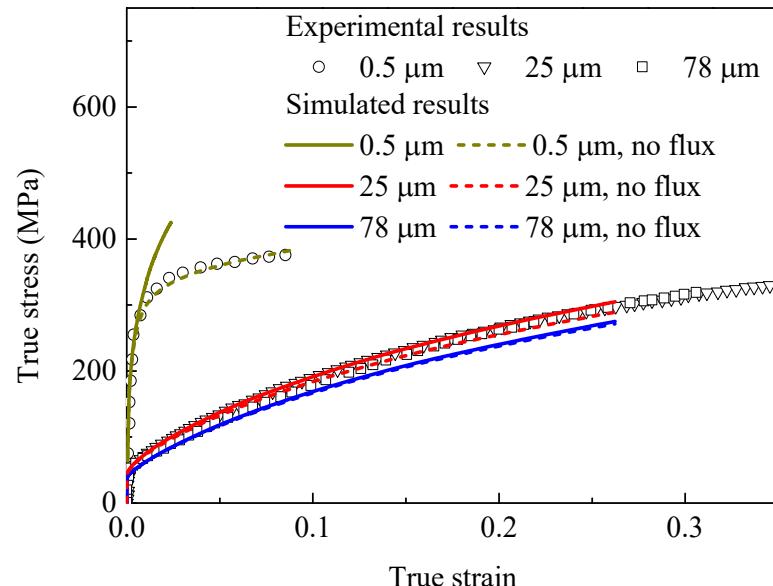


解决计算
效率问题

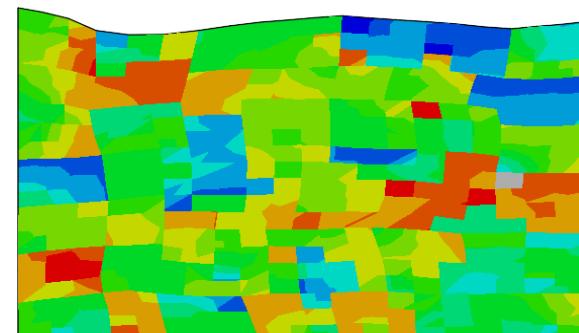
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

均匀材料的变形行为

参数	符号	值
弹性常数 (Pa)	C_{11}	168×10^9
	C_{12}	121.4×10^9
	C_{44}	75.3×10^9
伯格氏矢量 (m)	b	2.56×10^{-10}
刃型位错偶下界 (m)	\check{d}_e	1.536×10^{-9}
螺型位错偶下界 (m)	\check{d}_s	51.2×10^{-9}
位错增殖系数	k_2	25
刃型对增殖贡献系数	k_1	0.1
自扩散系数 (m^3/s)	D_{SD}^0	4.4×10^{-6}
自扩散激活熵 (J)	ΔH_{SD}	3.2×10^{-19}
固溶原子激活能 (J)	Q_s	2×10^{-19}
Peierls应力 (Pa)	τ_s, τ_p	5×10^5
双扭折宽度 (b)	w_k	10
粘滞系数	η	0.1
位错尝试越过障碍频率 (HZ)	f_{attack}	5×10^{10}
晶界穿透系数	χ	0
Hall-Petch系数 ($Pa \cdot m^{1/2}$)	k_{HP}	2.8×10^4
参考晶粒尺寸 (m)	d_e	3×10^{-6}
位错湮灭系数	k_{ann}	34.7



模型尺寸与晶粒尺寸关联



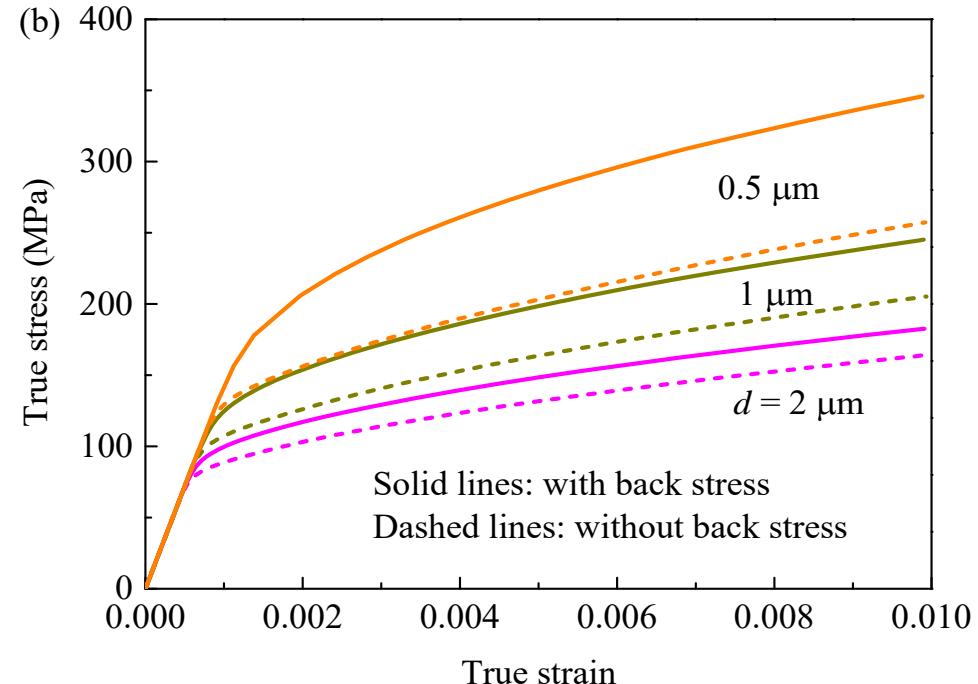
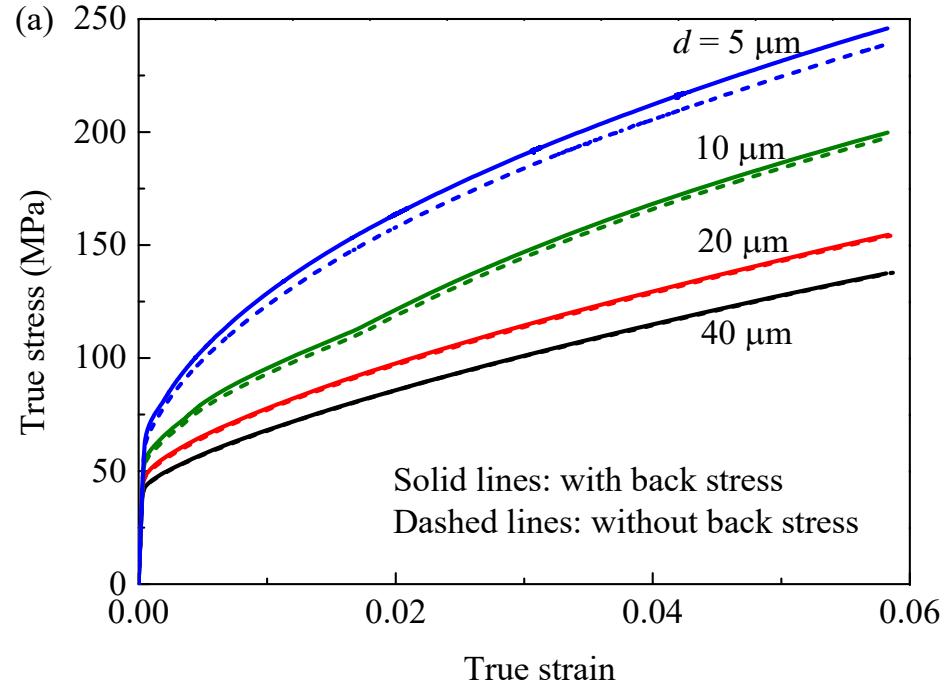
模型在真应变为26.2%时的几何形貌

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



均匀材料的变形行为

□ 背应力的影响



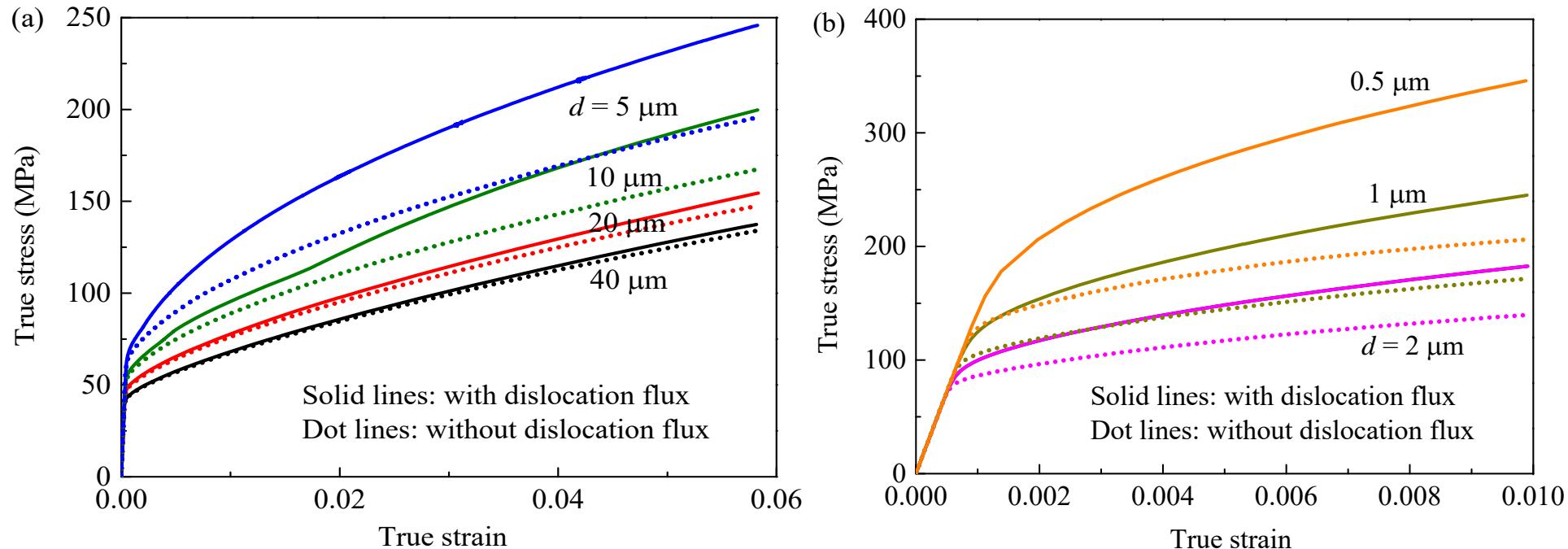
- ◆ 晶粒尺寸越小，背应力的影响越大，随动硬化越强；
- ◆ 背应力的作用在塑性变形初始阶段开始显现，在后续应变硬化阶段无明显增加。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



均匀材料的变形行为

□ 位错流动的影响



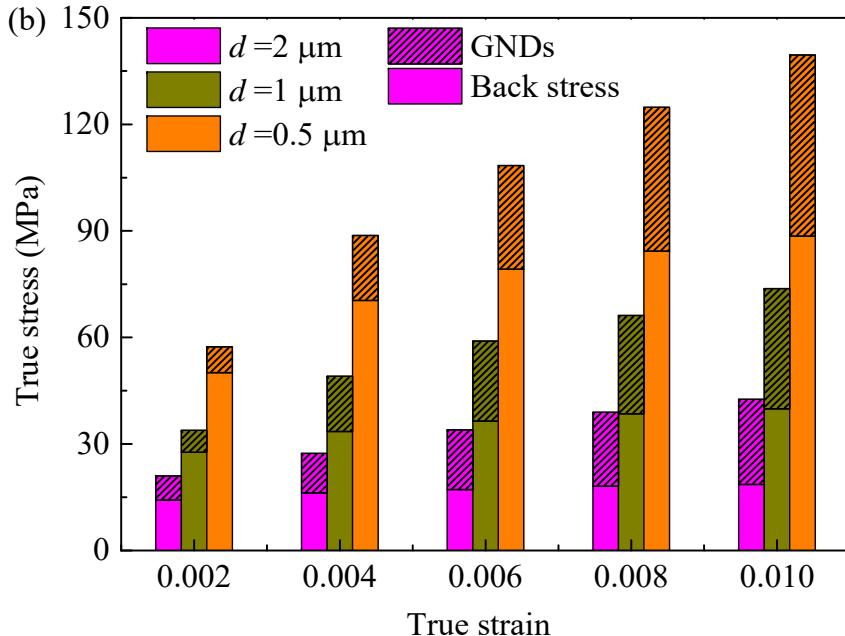
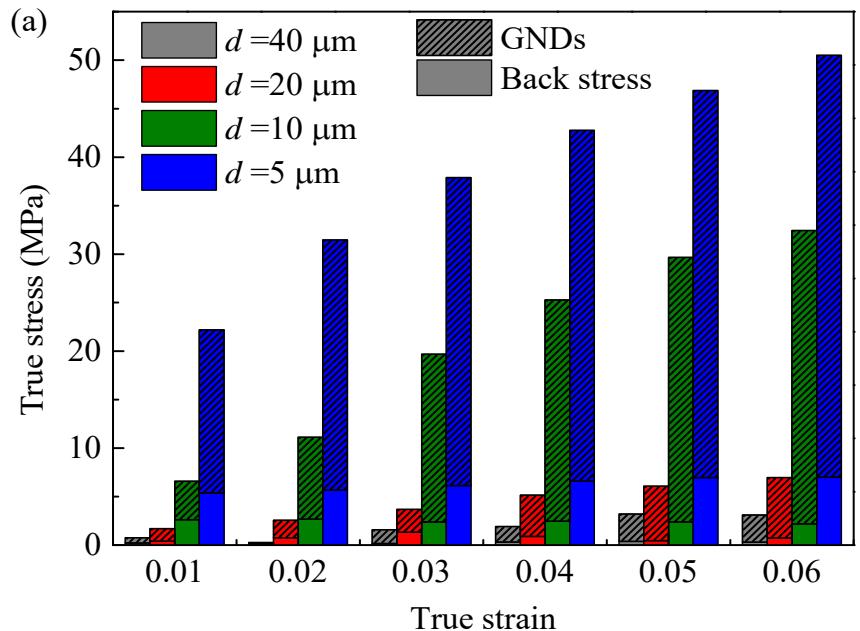
- ◆ 位错流动项的影响随着晶粒尺寸的减小而增加；
- ◆ 位错流动=GND密度+背应力，需进一步分离二者的影响。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



均匀材料的变形行为

□ GND和背应力的影响

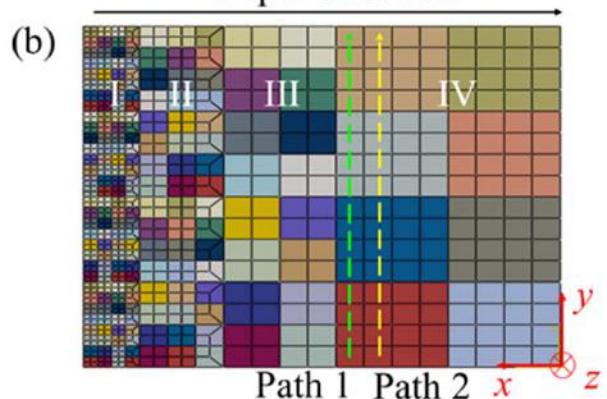
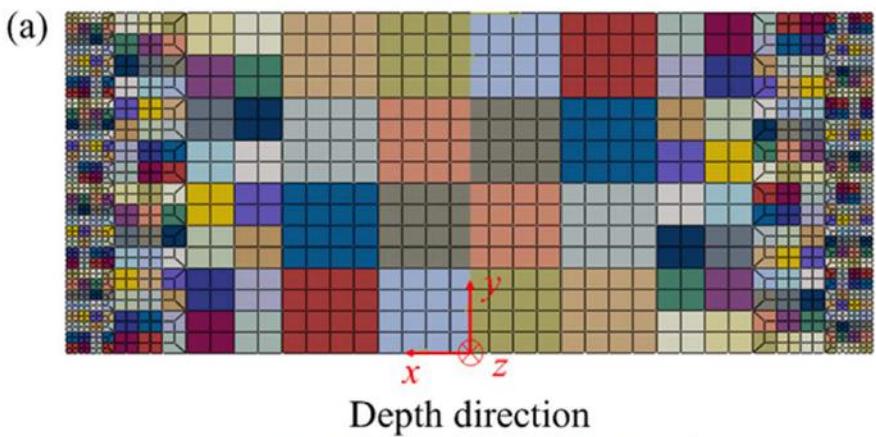


- ◆ 对于粗晶铜($d > 1 \mu\text{m}$)，随着应变的增加，背应力几乎没有变化，GND密度对总应力的贡献逐渐增加，粗晶中的背应力很小；
- ◆ 晶粒尺寸越小，GND密度对应变硬化的贡献越大，背应力越大，随动硬化越强。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

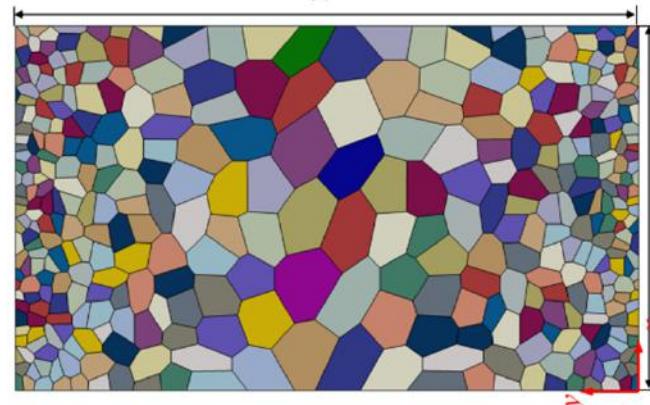
梯度材料的强韧机制

□ 有限元模型



200 个晶粒，848个C3D8单元

y 方向单轴拉伸，应变率 $6 \times 10^{-4} / \text{s}$



深度(x)方向晶粒尺寸分布

case I ($\varepsilon = 5.8\%$)

40 μm 、20 μm 、10 μm 和5 μm

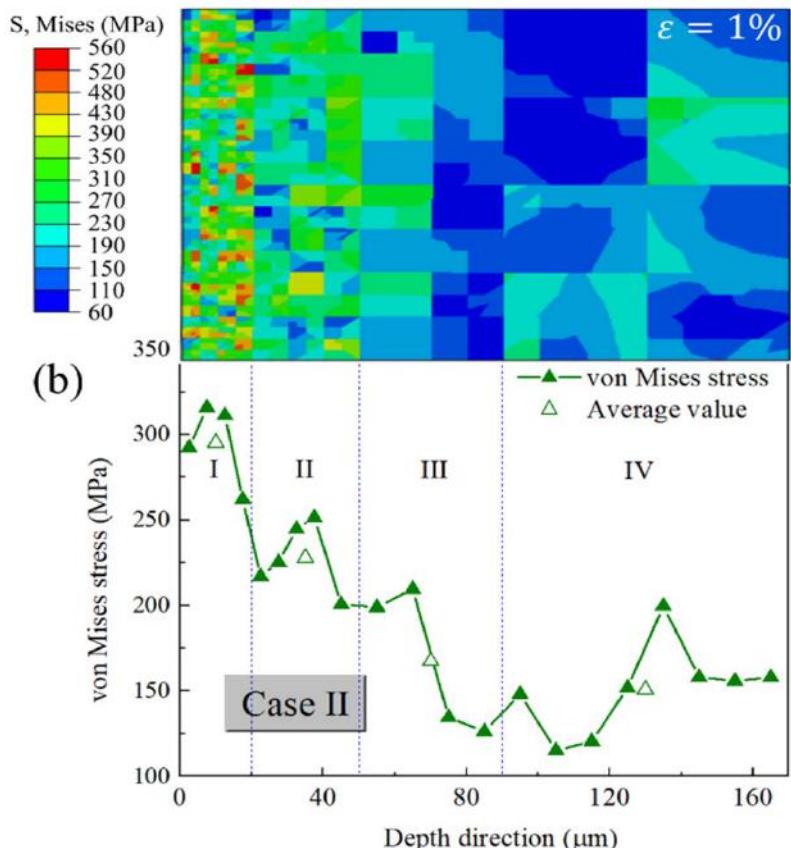
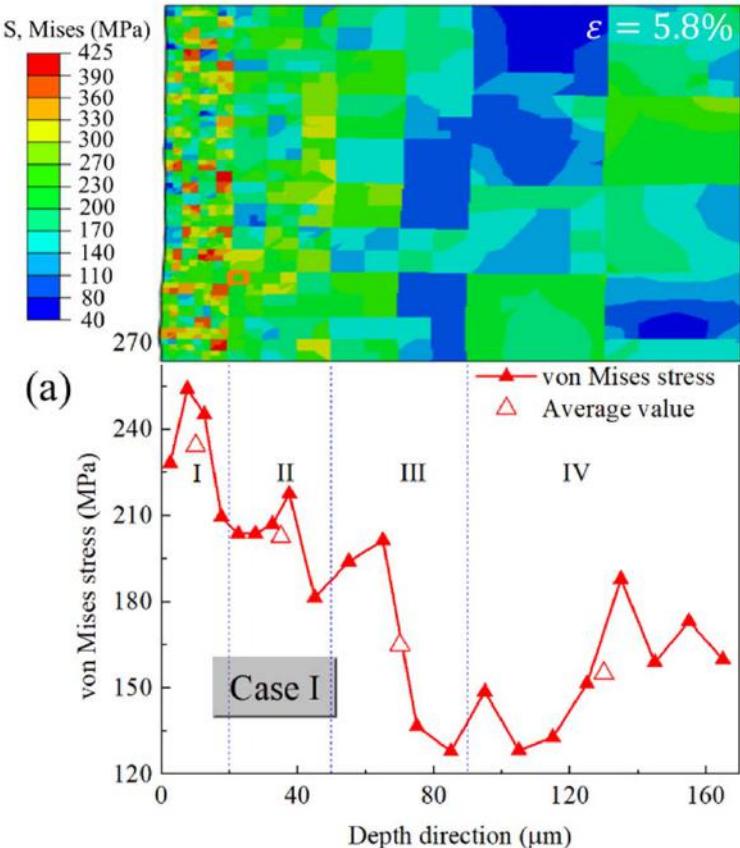
case II ($\varepsilon = 1\%$)

4 μm 、2 μm 、1 μm 和0.5 μm

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

梯度材料的强韧机制

□ 应力场



◆ 梯度分布应力场，由小晶粒至大晶粒逐渐降低

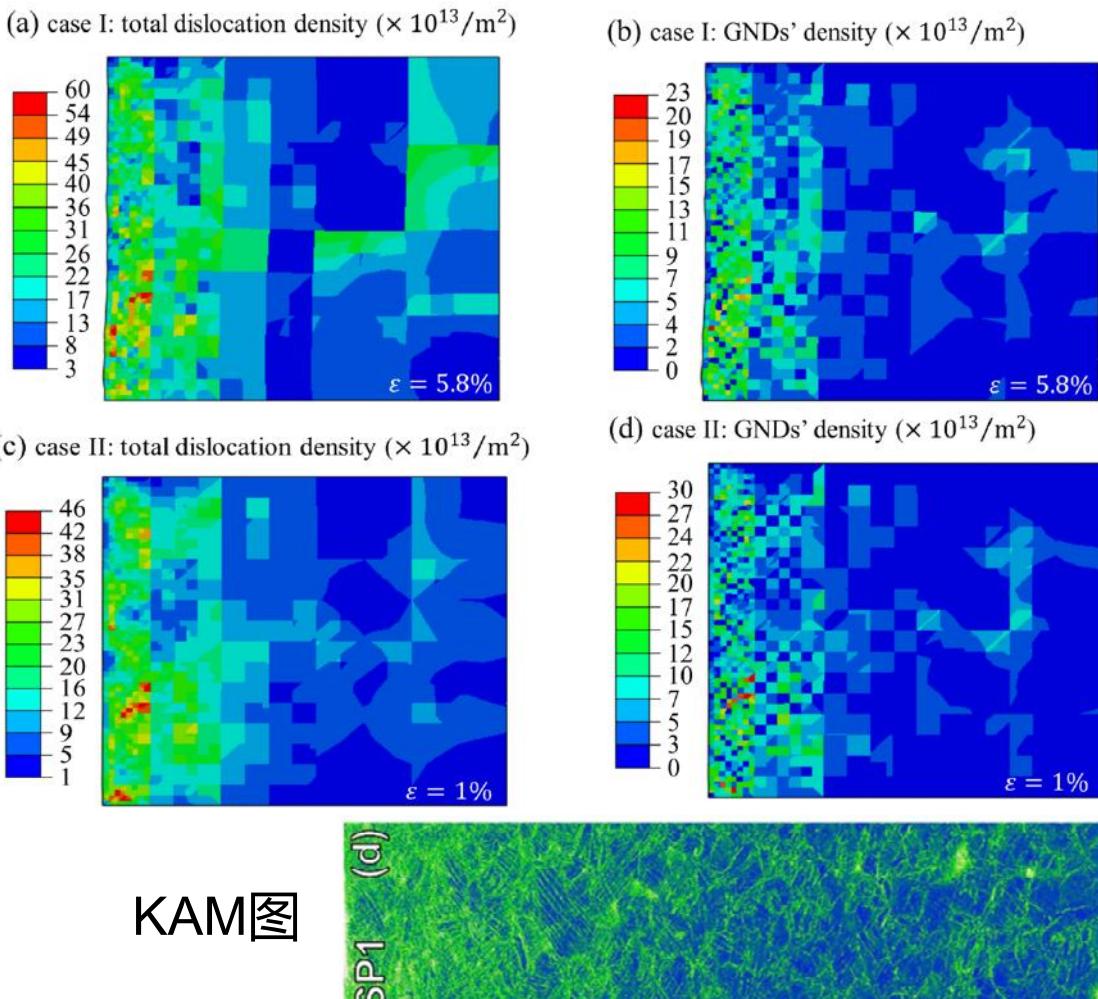
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

梯度材料的强韧机制



□ GND密度和总位错密度分布

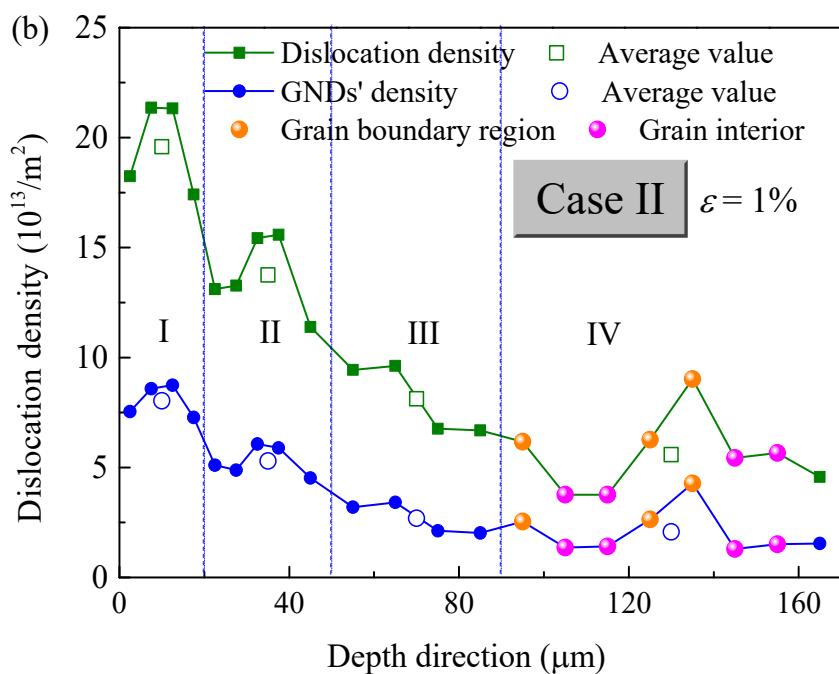
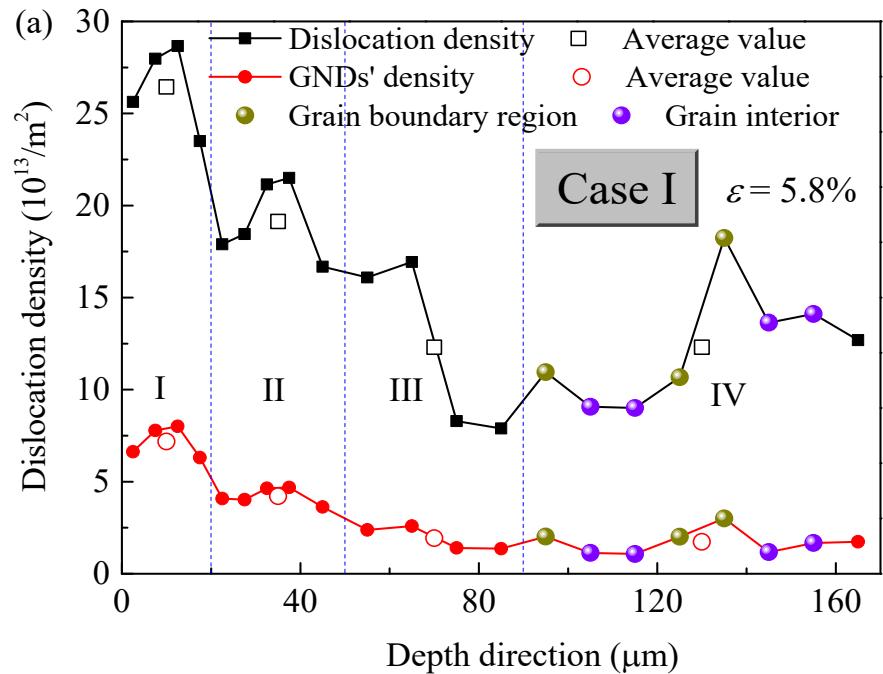
◆ 梯度分布的GND密度和总位错密度，规律与KAM表征结果一致。



4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

梯度材料的强韧机制

□ GND密度和总位错密度分布



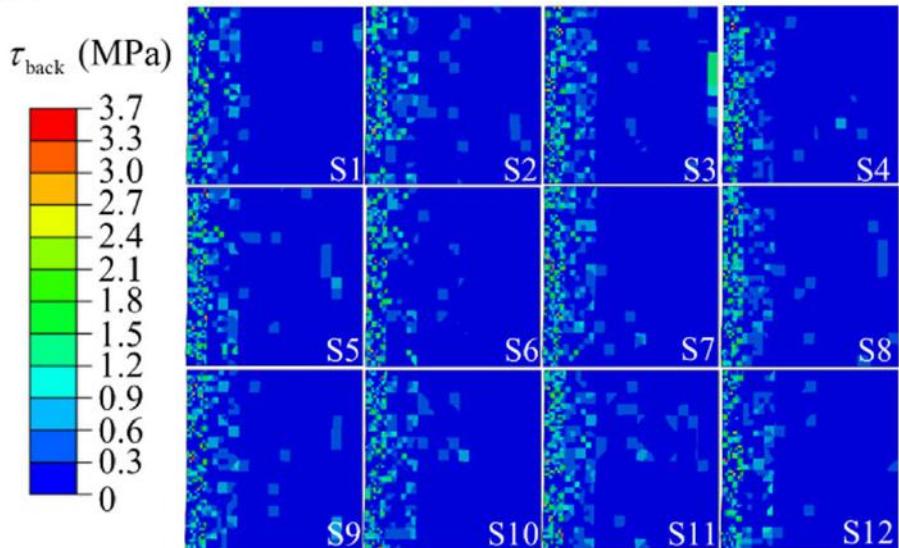
- ◆ Case I: I至IV层中GND密度占总位错密度的比例分别为27.2%、22%、15.7%和14%；
- ◆ Case II: I至IV层对应比例为: 41.0%、38.5%、33.1%和37.1%。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

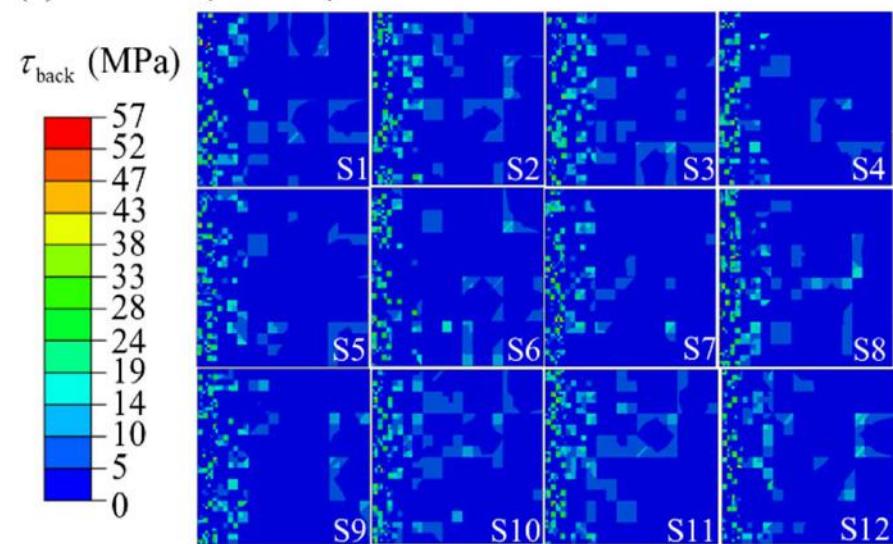
梯度结构材料的强韧机制

□ 背应力

(a) Case I ($\varepsilon = 5.8\%$)



(b) Case II ($\varepsilon = 1\%$)



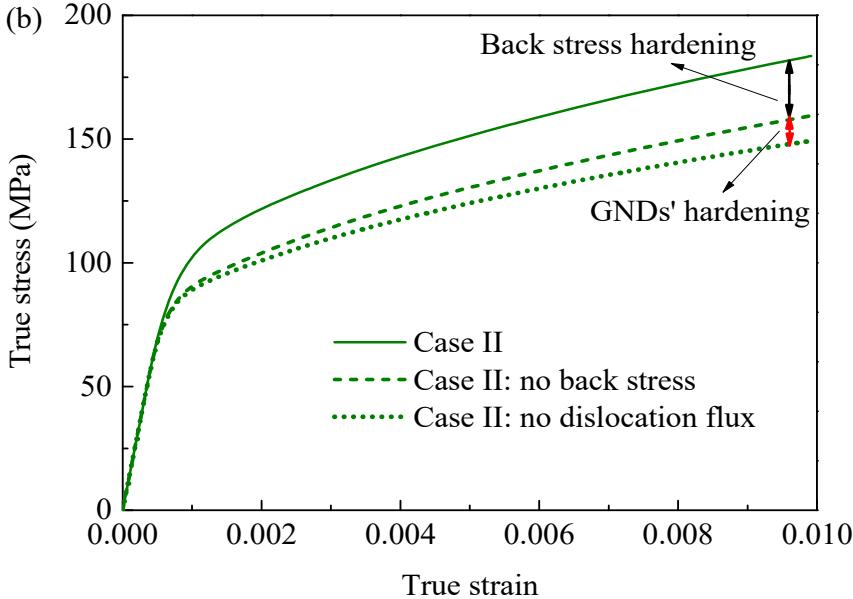
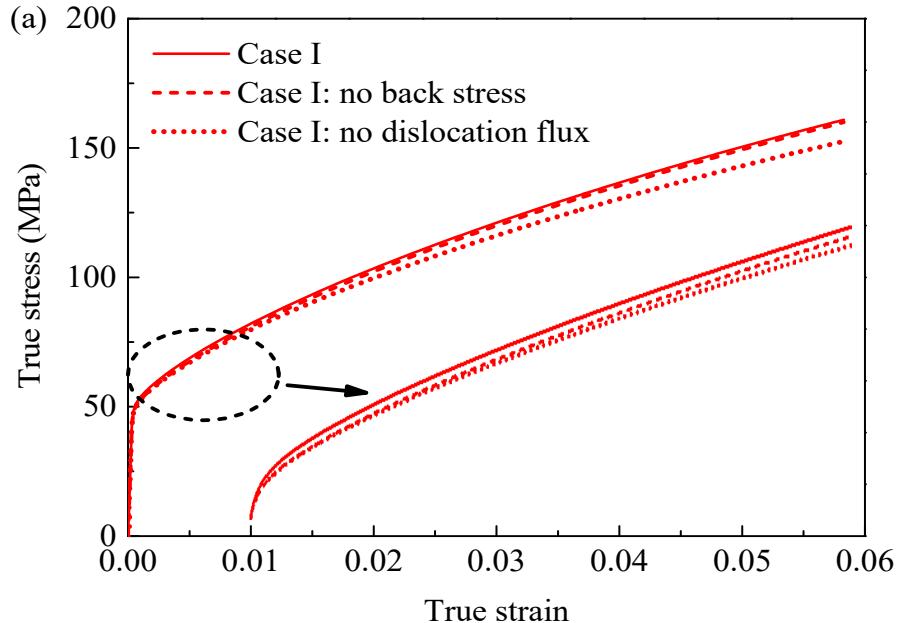
- ◆ 背应力呈梯度分布，由小晶粒至大晶粒逐渐减小；
- ◆ Case II中的背应力远大于case I，与均匀晶粒结构材料的模拟结论一致。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



梯度结构材料的强韧机制

□ 背应力和GND密度的影响



- ◆ 对于case I，在整个变形阶段背应力的影响可以忽略；随着应变的增加GND密度对应变硬化的贡献逐渐增加，但是影响仍然不大，贡献仅为8.2 MPa，占总应力的5%。
- ◆ 对于case II，背应力对总应力贡献为24.2 MPa，GND密度对总应力约为10 MPa，分别占总应力的13.2%和5.4%。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

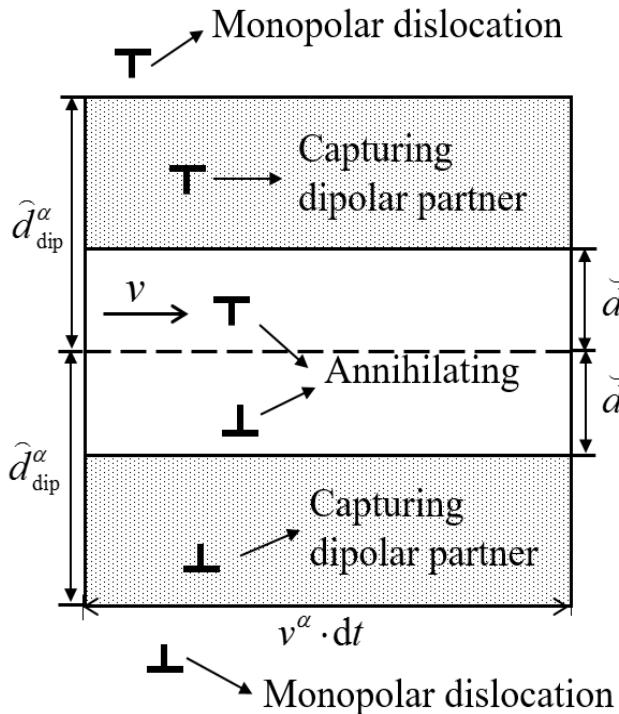


结论

- I. 对于均匀晶粒结构铜，**背应力随着晶粒尺寸的减小而增加**，当晶粒尺寸大于 $5\mu\text{m}$ 时背应力对应力-应变曲线的影响可以忽略。背应力在变形初期开始出现，且随应变的增加无明显增加。
- II. **晶粒尺寸越小，GND密度对应变硬化的贡献越大**；GND密度对硬化的贡献随应变的增加逐渐增加。随着晶粒尺寸的减小，GND密度和总位错密度均逐渐升高。
- III. 梯度晶粒结构材料中的**GND自身引起的各向同性硬化和其非均匀分布引起的随动硬化主要来源于梯度层中的细化晶粒**。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

考虑多重物理机制的晶体塑性本构模型

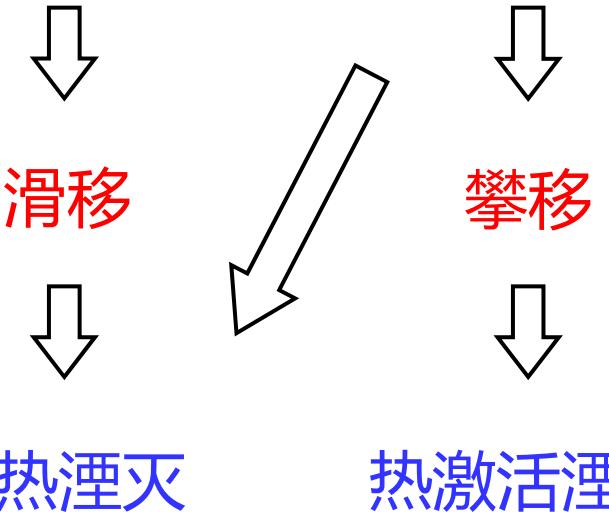


临界距离

$$\hat{d}_{\text{dip}}^{\alpha} = \frac{1}{8\pi} \frac{Gb}{|\tau^{\alpha}|} \frac{1}{1-v}$$

$$\check{d}_{\text{dip}}^{\alpha} = b$$

单极位错 \rightarrow 位错偶极子



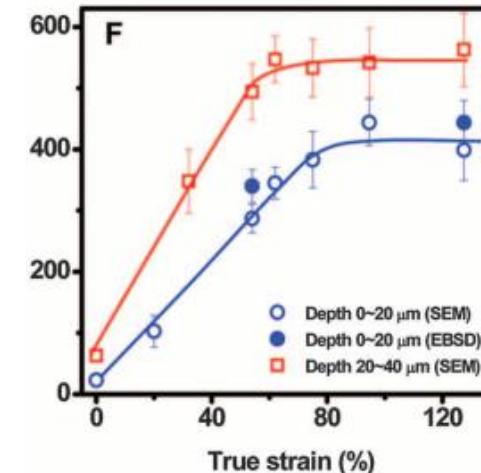
单极位错密度演化

$$\dot{\rho}_{\text{mnp}}^{\alpha} = \dot{\rho}_{\text{mnp}}^{\alpha+} - \dot{\rho}_{\text{mnp}}^{\alpha-}$$

位错偶极子密度演化

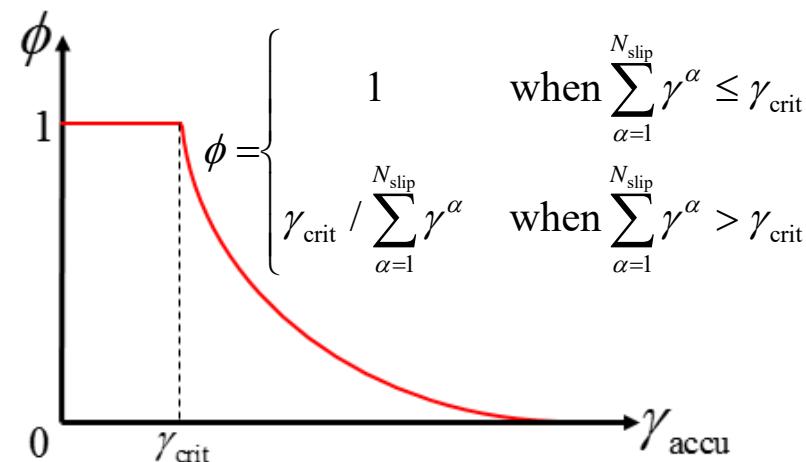
$$\dot{\rho}_{\text{dip}}^{\alpha} = \dot{\rho}_{\text{dip}}^{\alpha+} - \dot{\rho}_{\text{dip-athermal}}^{\alpha-} - \dot{\rho}_{\text{dip-thermal}}^{\alpha-}$$

变形过程中晶粒尺寸的演化



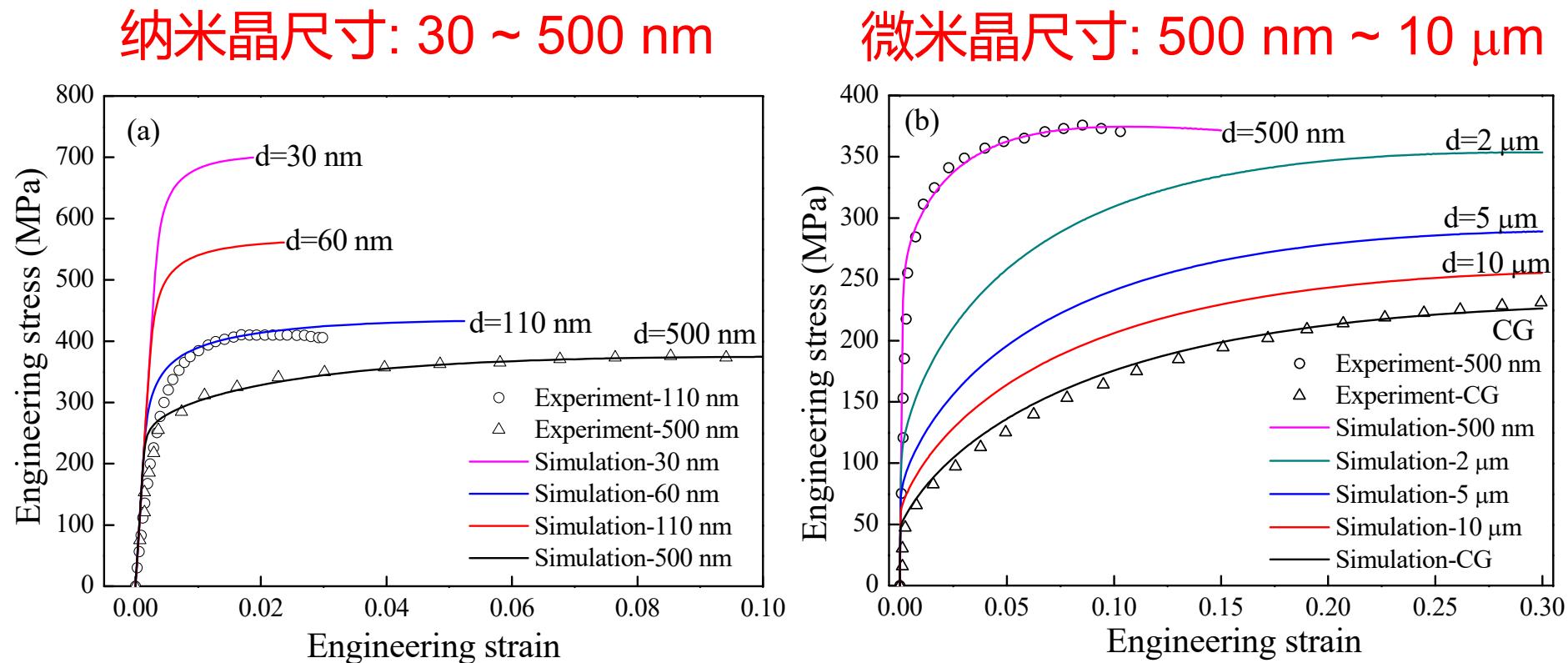
$$d_{\text{grain}} = d_0 + v_{\text{gg}} t \text{ if } d_{\text{grain}} < d_s$$

定义损伤变量



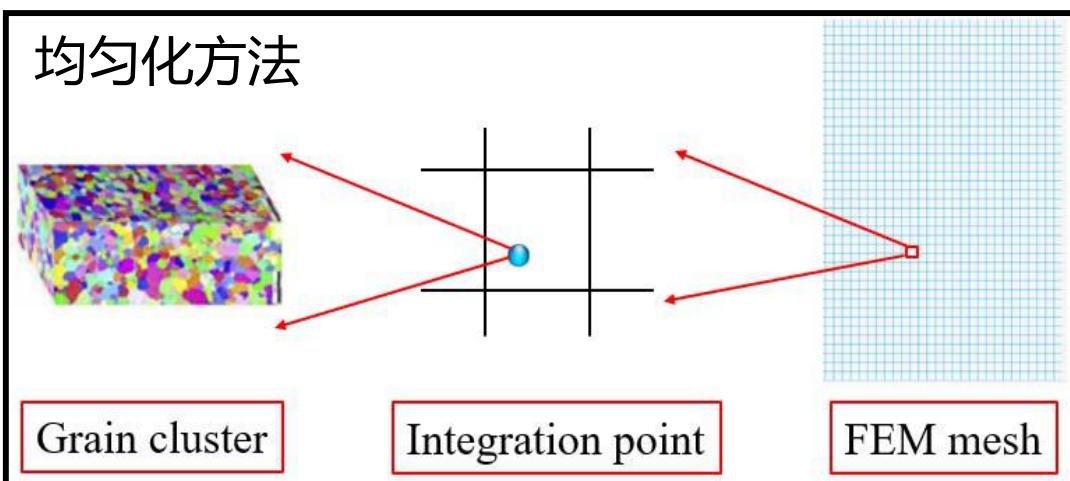
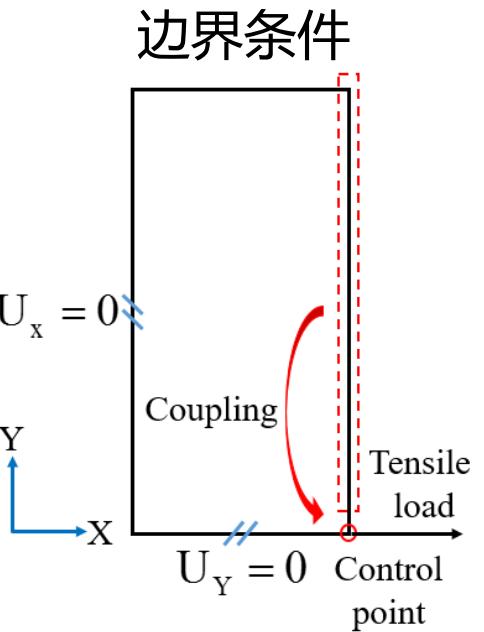
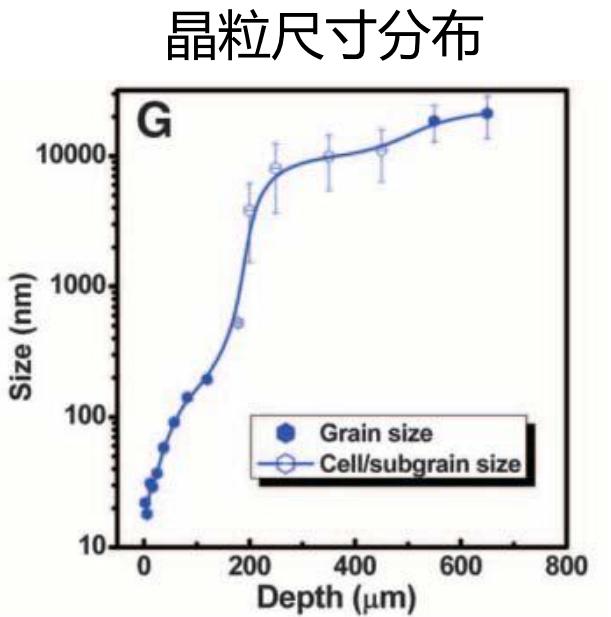
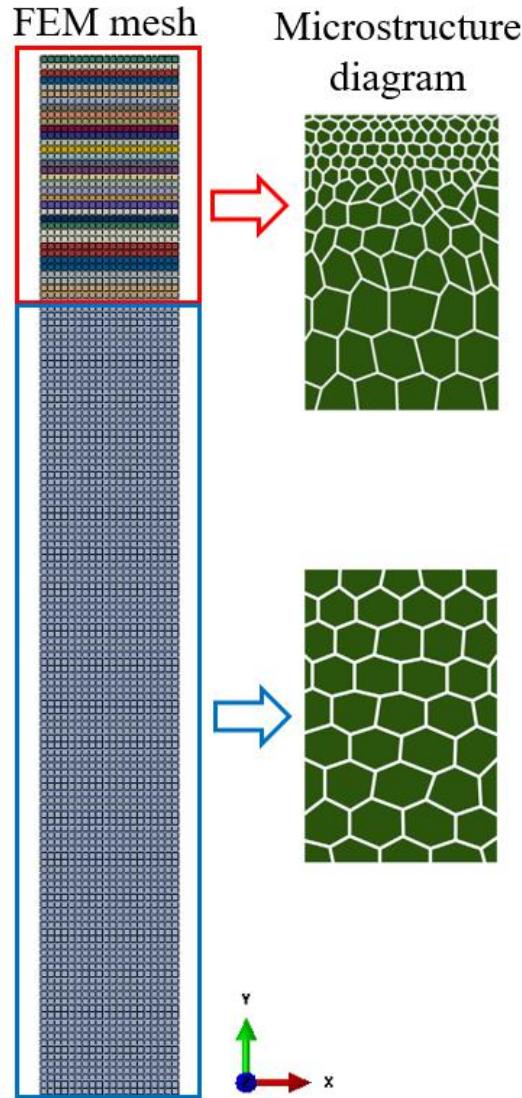
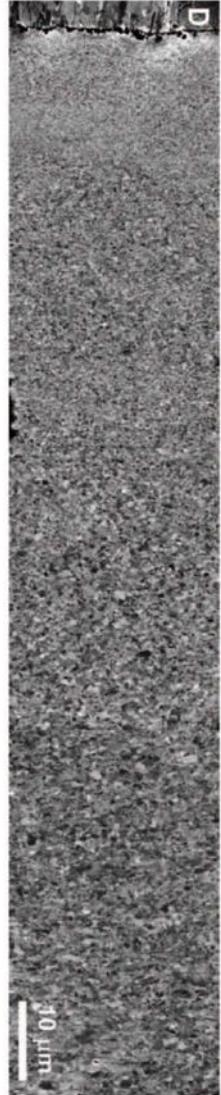
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

本构模型验证 (以铜为例)



4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

梯度纳米晶粒结构的几何模型

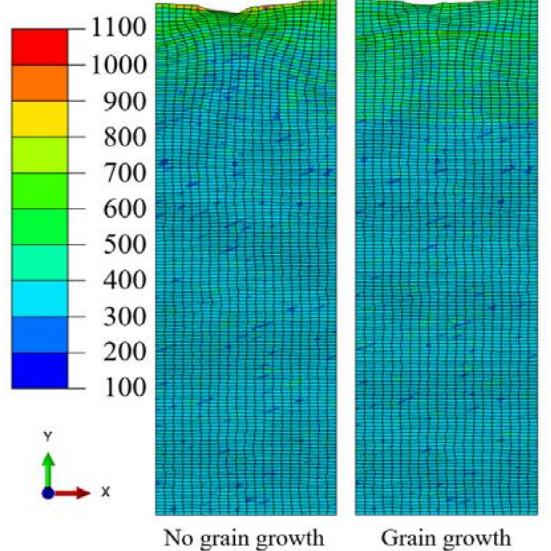


Layer	Depth (mm)	Grain size (nm)
GL-1	10	26
GL-2	30	64
GL-3	50	75
GL-4	70	111
GL-5	90	143
GL-6	110	180
GL-7	130	235
GL-8	150	327
GL-9	170	551
GL-10	190	1600
GL-11	210	3605
GL-12	230	5662
GL-13	250	7035
GL-14	270	7843
GL-15	290	8592
GL-16	310	9071
GL-17	330	9411
GL-18	350	9762
GL-19	370	9950
GL-20	390	10000
GL-21	410	10750
GL-22	430	11362
GL-23	450	11976
GL-24	470	12820
GL-25	490	13628
GL-26	520	15836
GL-27	560	18133
GL-28	600	20206
GL-29	640	21036
GL-30	680	23582

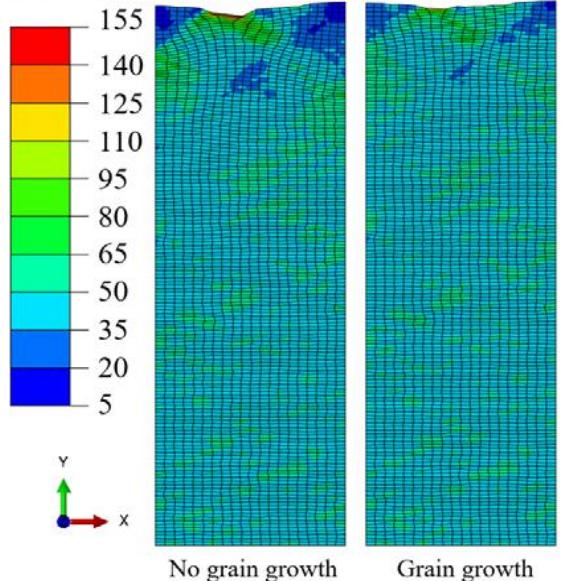
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



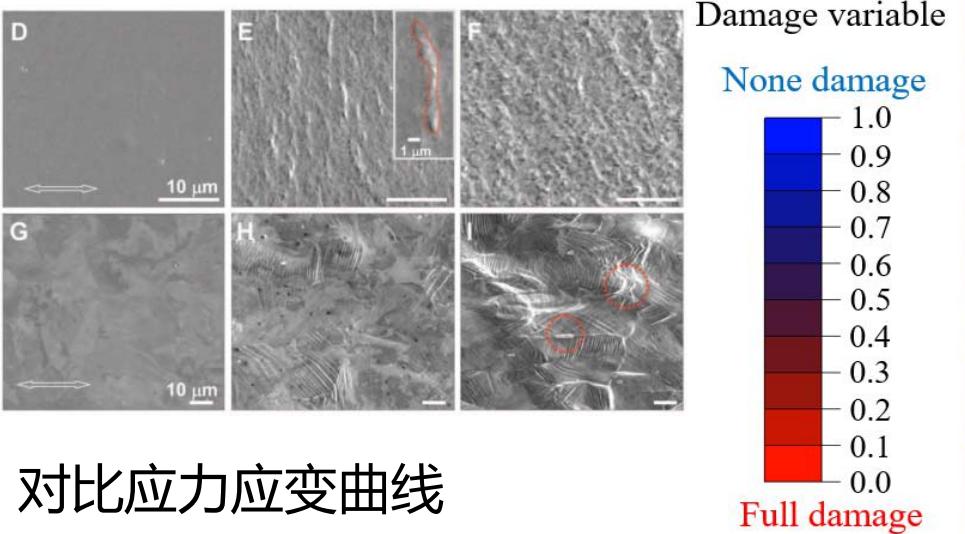
(a) Mises stress (MPa)



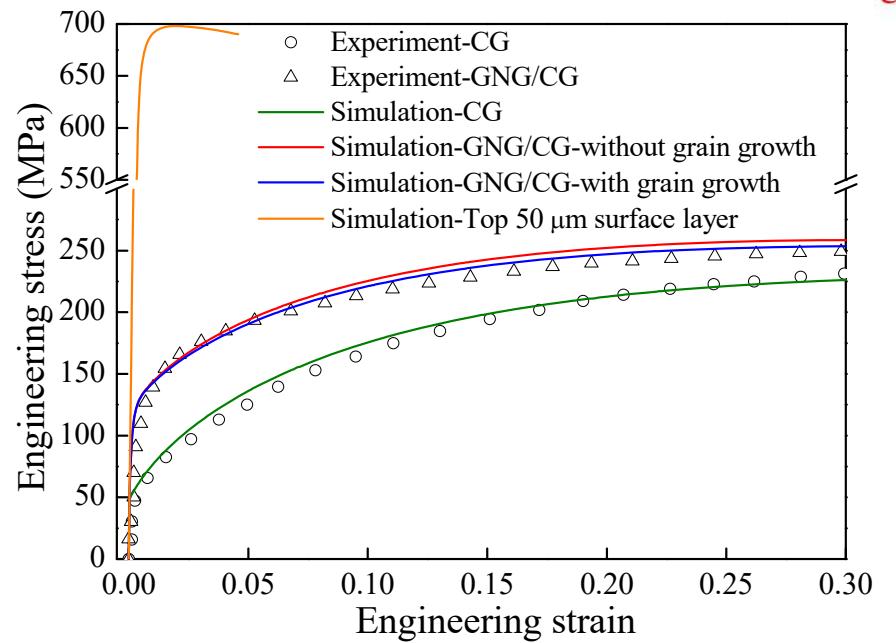
(b) Logarithmic strain along X-axis (%)



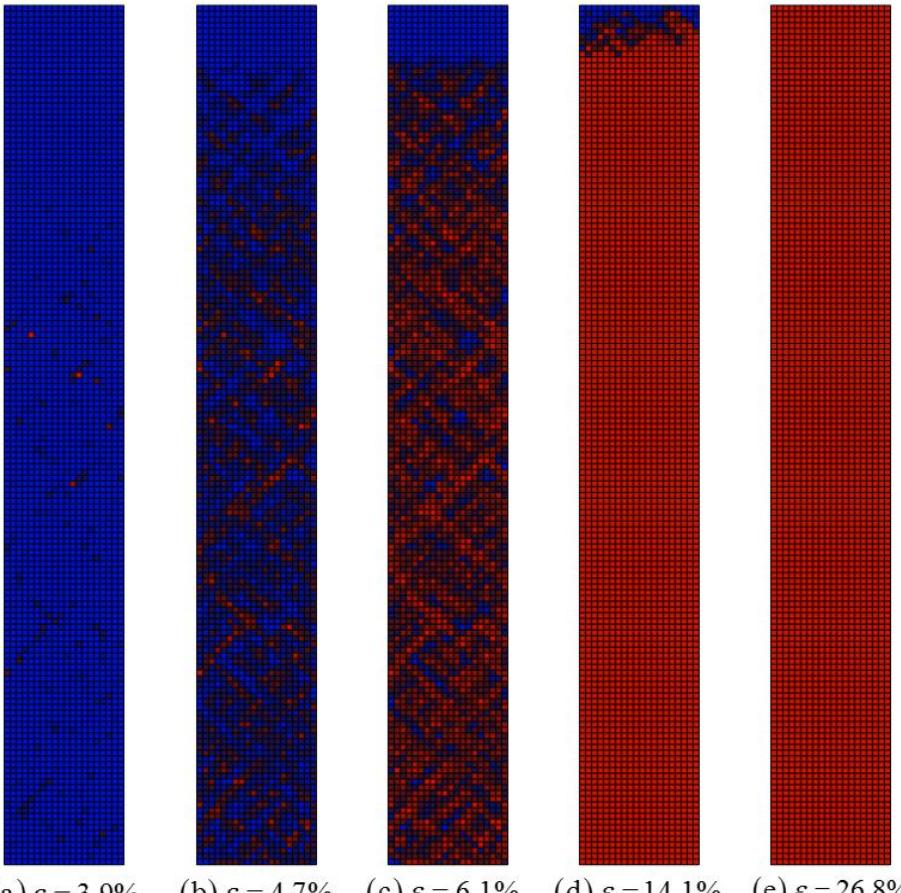
表征观测的裂纹位置



对比应力应变曲线



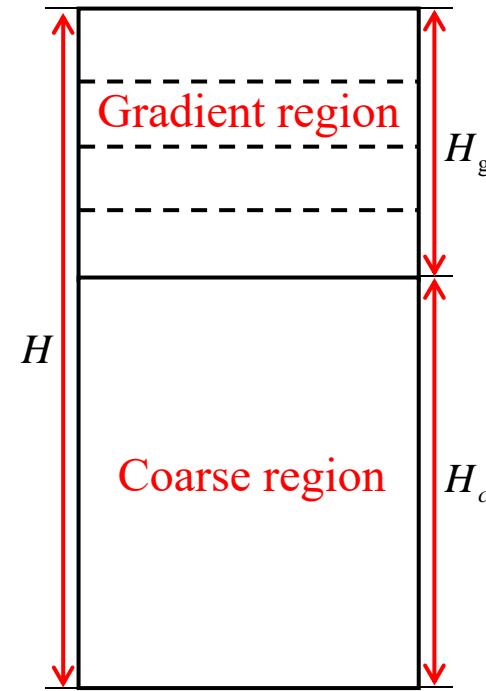
模拟损伤演化过程



实验表明梯度纳米晶铜中微裂纹最先在粗晶区的晶界处形成。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

调整梯度层厚度分数和粗晶层晶粒尺寸

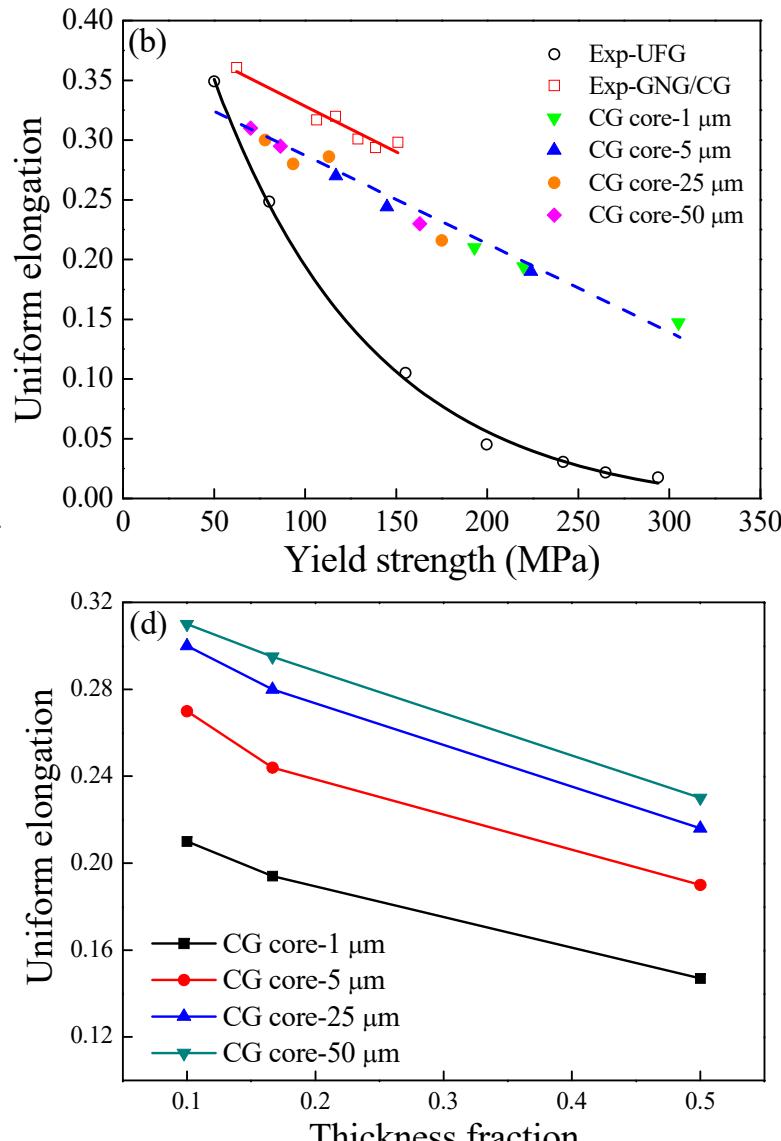
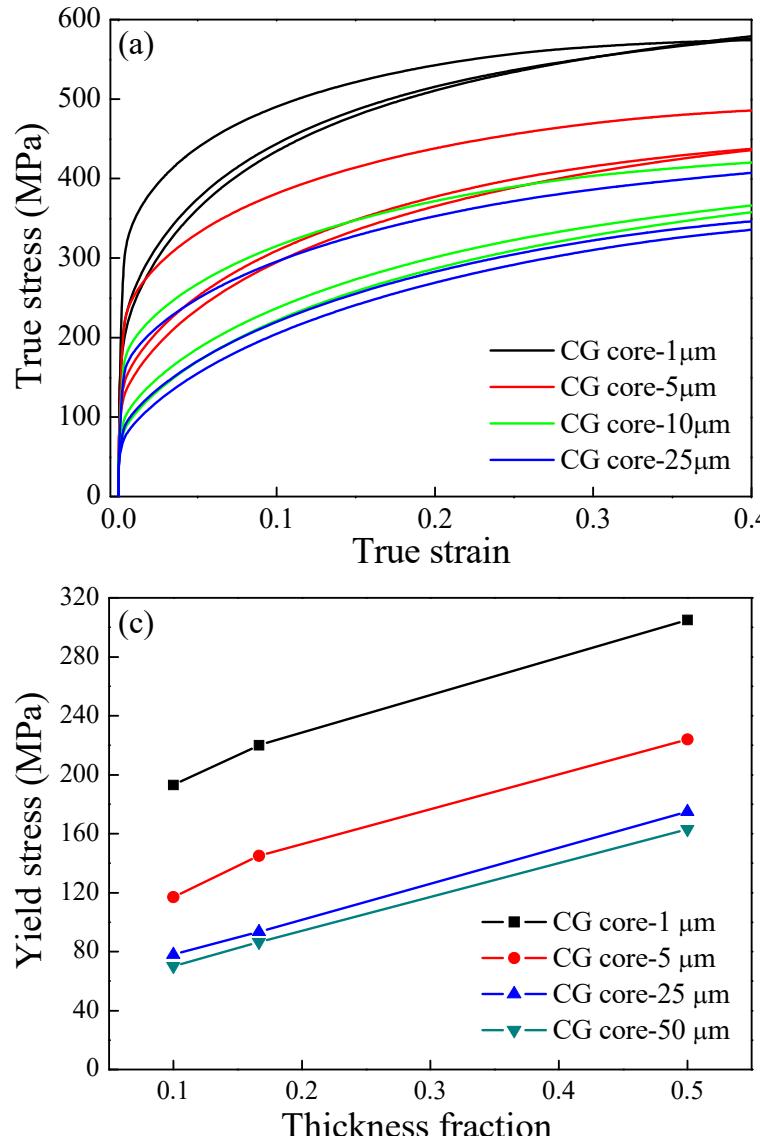


$$\text{厚度分数定义: } c = \frac{H_g}{H}$$

不同厚度分数: $c = 1/2, 1/6, 1/10$

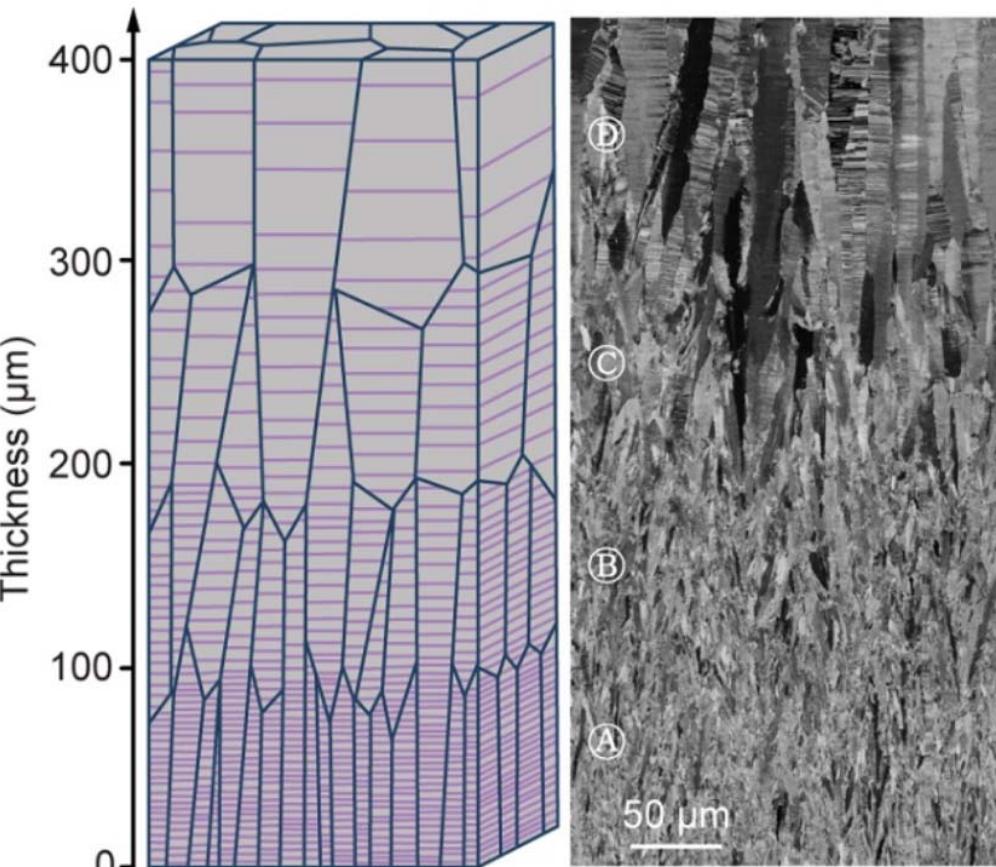
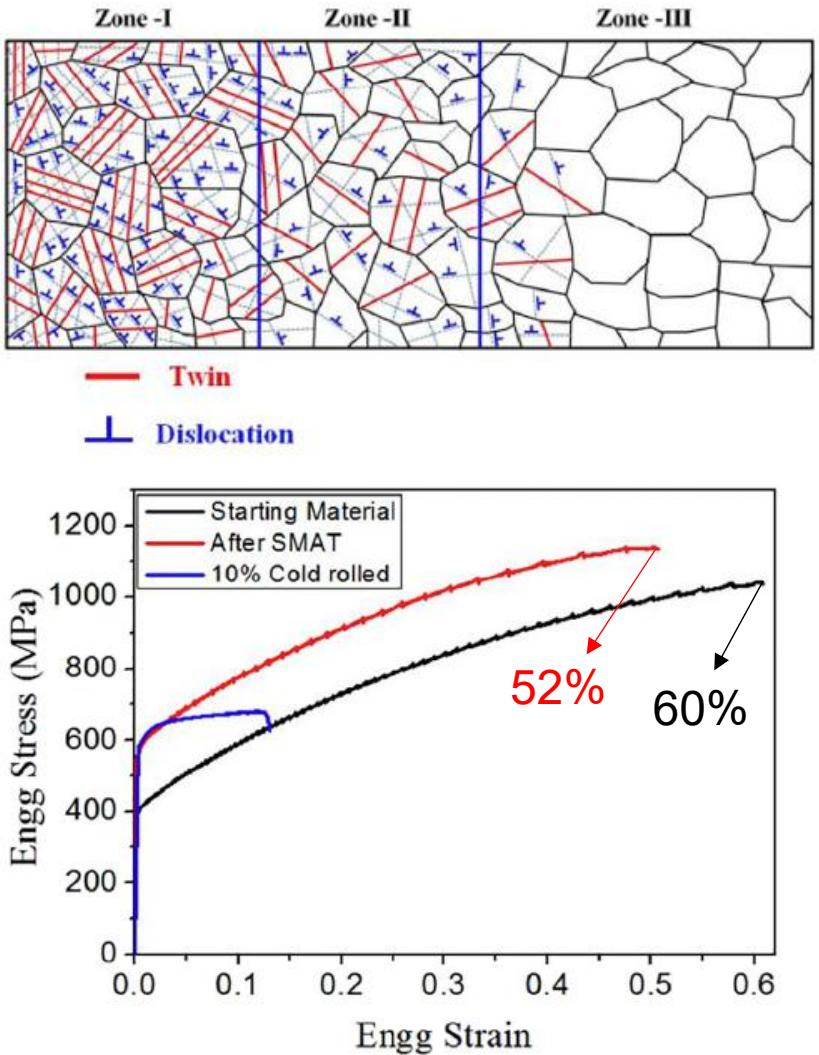
粗晶晶粒尺寸: $d_{\text{grain}} = 1, 5, 25, 50 \mu\text{m}$

描述晶粒尺寸分布: $d_{\text{grain}} = m \cdot 10^{nh}$



4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

梯度孪晶结构



通过系统TEM实验和原子模拟发现，梯度孪晶结构不寻常的强韧性匹配能力是由晶粒内部超高密度位错提供的。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究

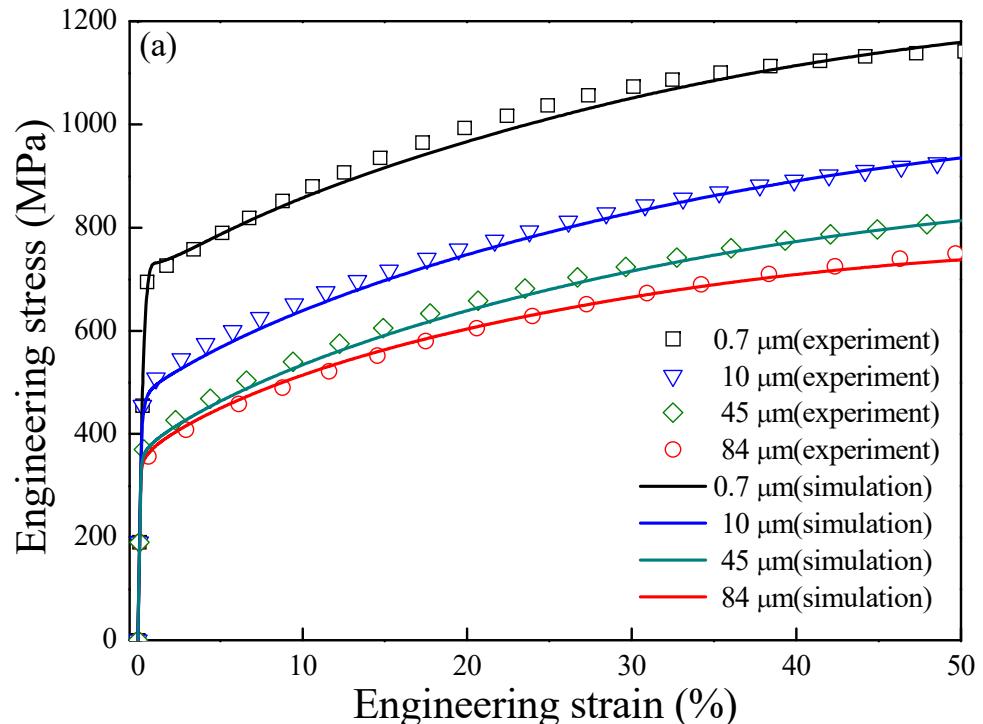


本构模型验证 (以TWIP钢为例)

基于位错塞积的背应力模型

$$\tau_b^\alpha = \frac{Gb}{\Lambda_s^\alpha} N^\alpha \left(1 - \frac{N^\alpha}{N^*} \right)$$

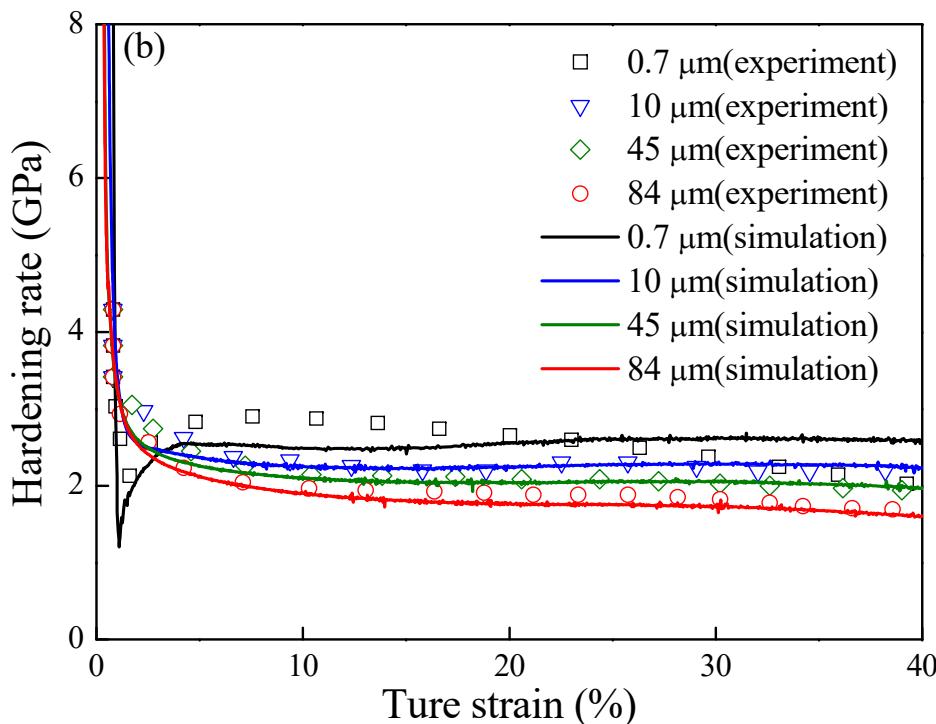
塞积位错个数 $\dot{N}^\alpha = \frac{l}{b} \left(1 - \frac{N^\alpha}{N^*} \right) |\dot{\gamma}^\alpha|$



考虑尺寸效应的孪晶形核应力

$$\hat{\tau}_t = \frac{\Gamma_{sf}}{b_p} + \frac{Gb_p}{d_{grain}}$$

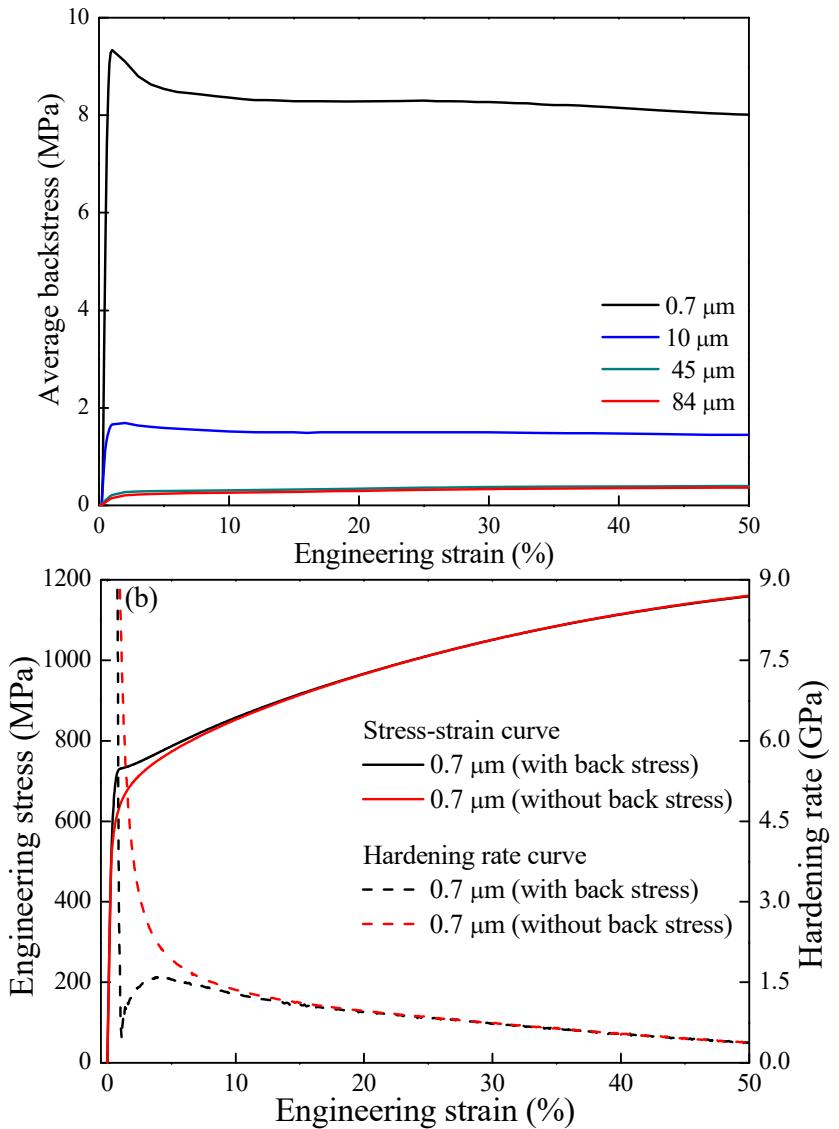
位错密度演化 $\dot{\rho}^\alpha = \left(\frac{1 - N^\alpha / N^*}{b \cdot \Lambda_s^\alpha} + \frac{k}{b} \sqrt{\rho^\alpha} - \frac{2d_{anni}}{b} \cdot \rho^\alpha \right) |\dot{\gamma}^\alpha|$



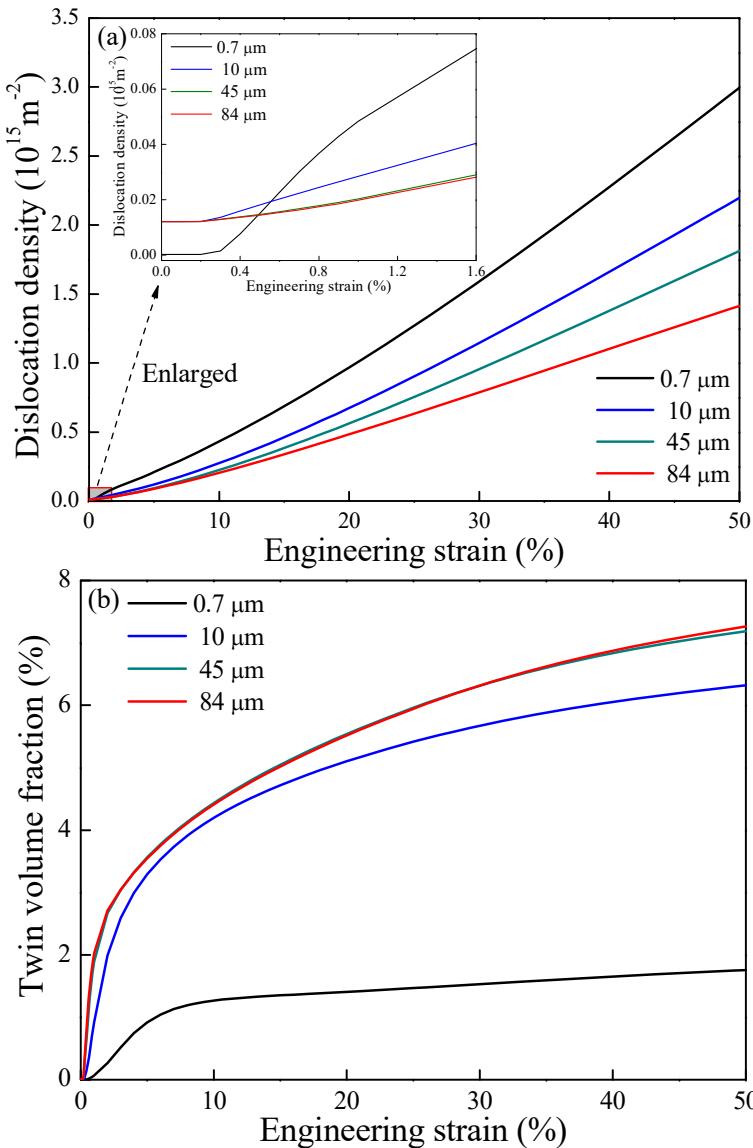
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



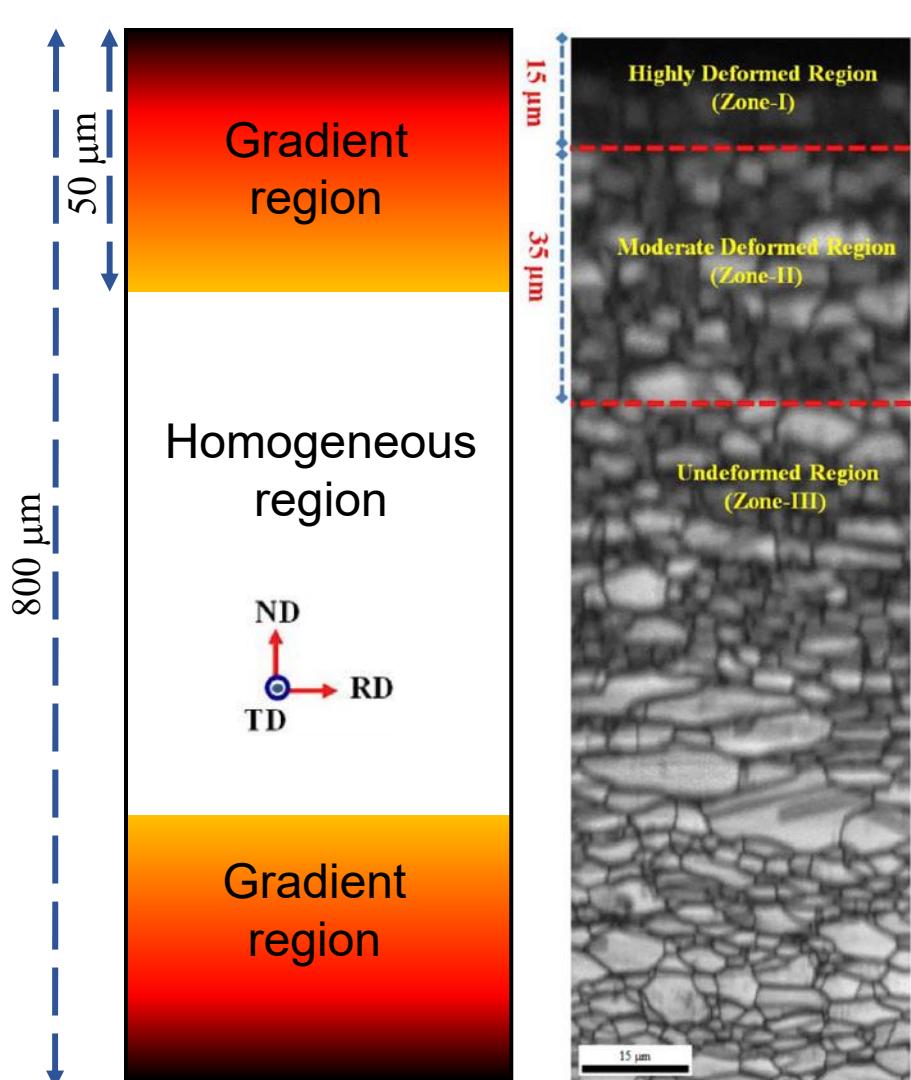
背应力的影响



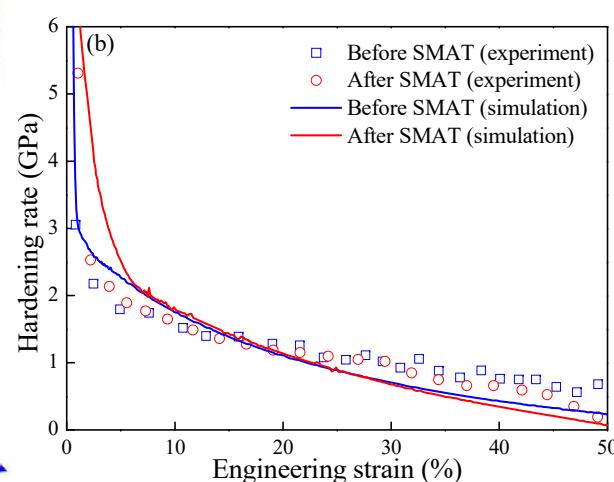
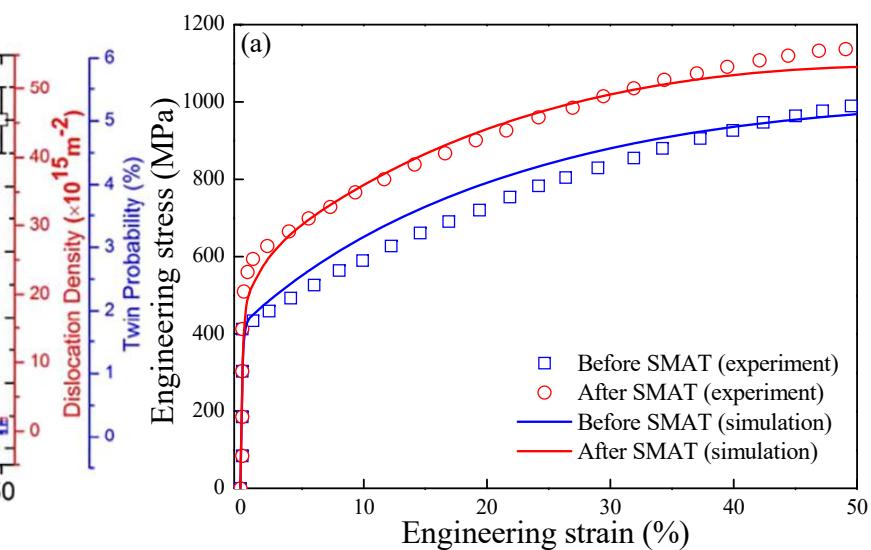
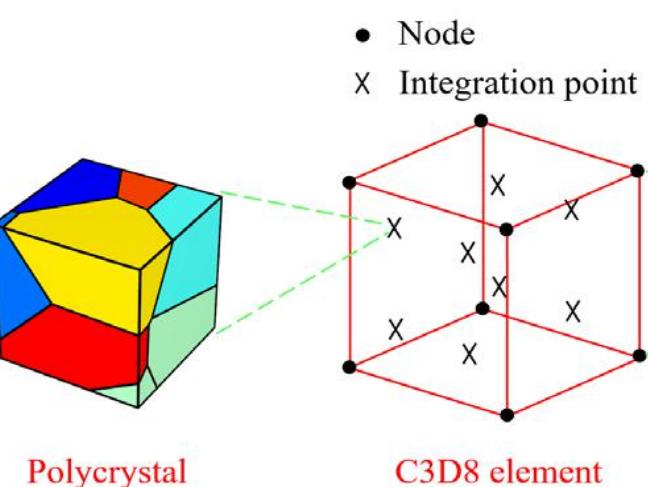
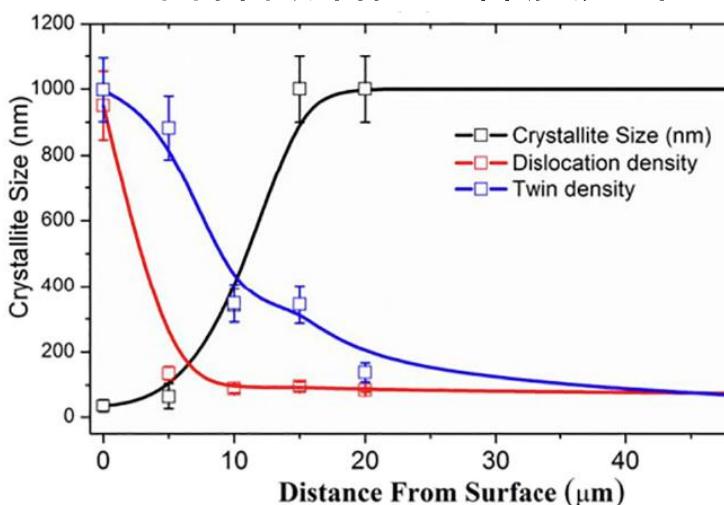
晶粒尺寸对微结构演化的影响



4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



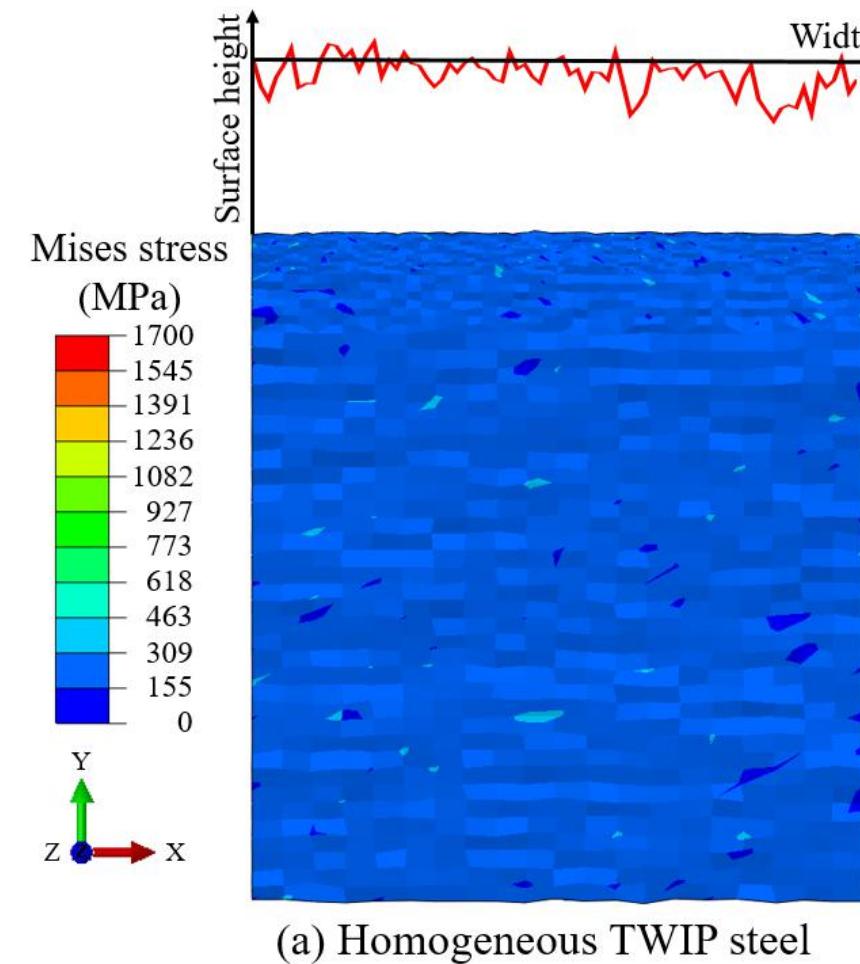
各种微结构的梯度分布



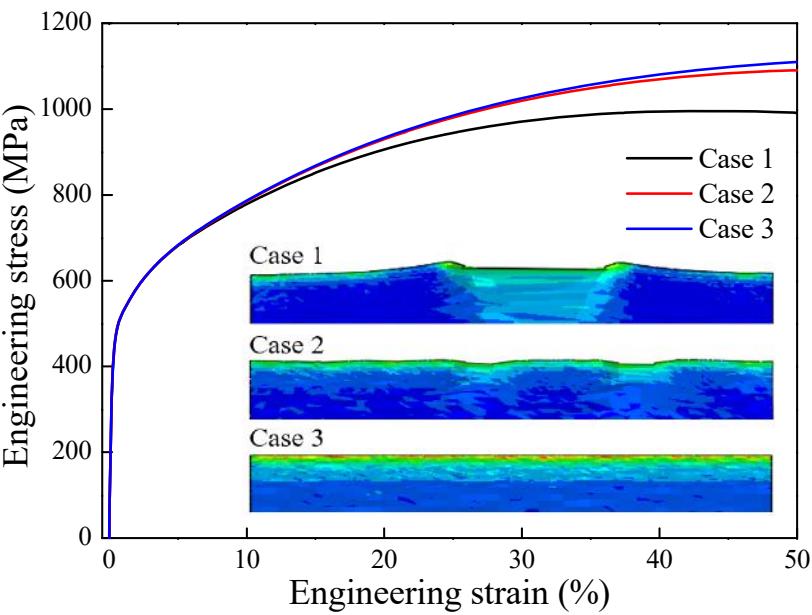
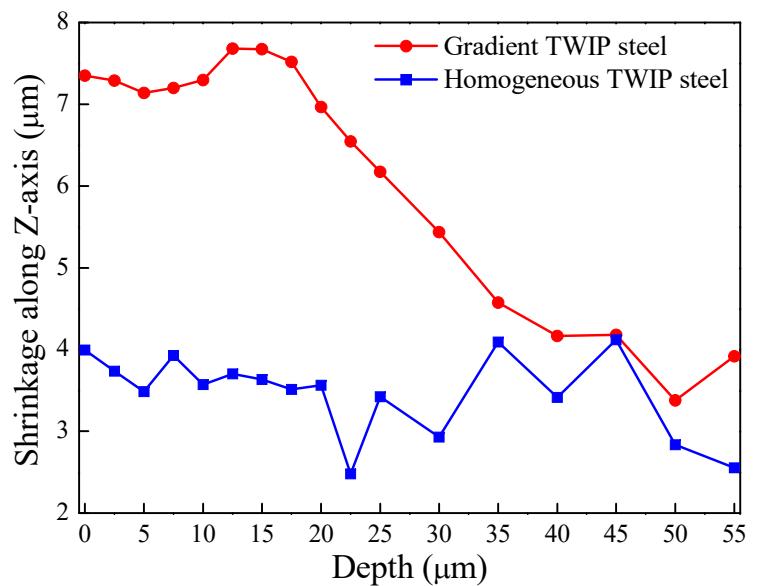
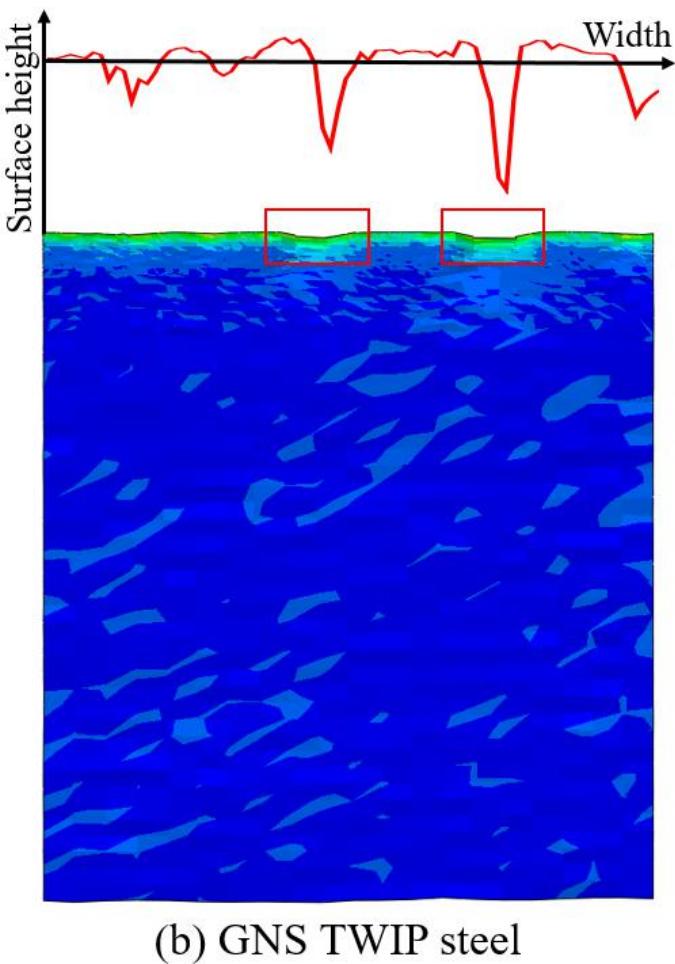
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



应力云图



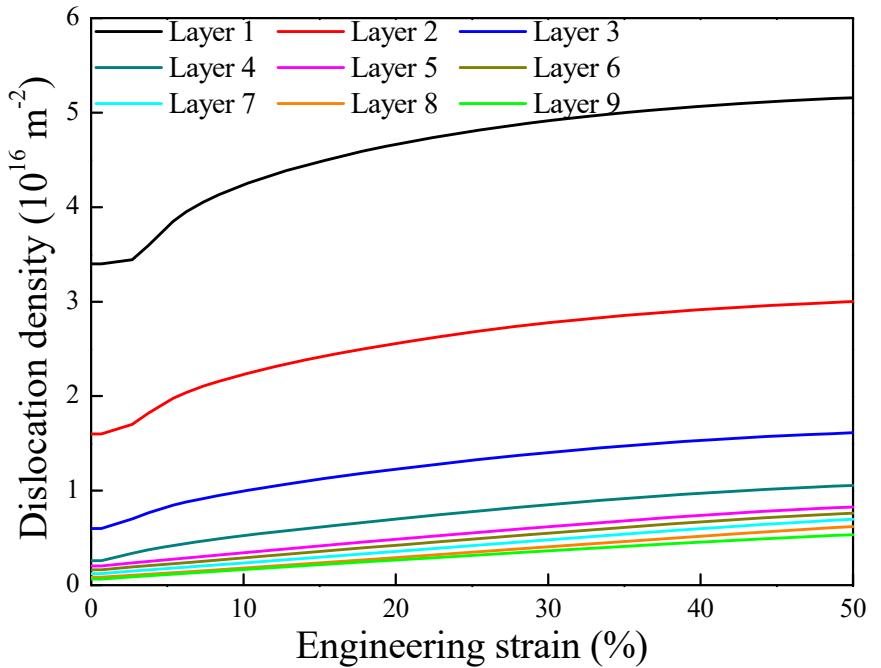
表面凹陷区域分析



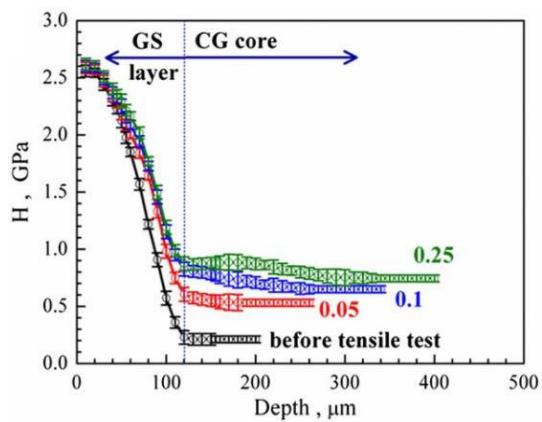
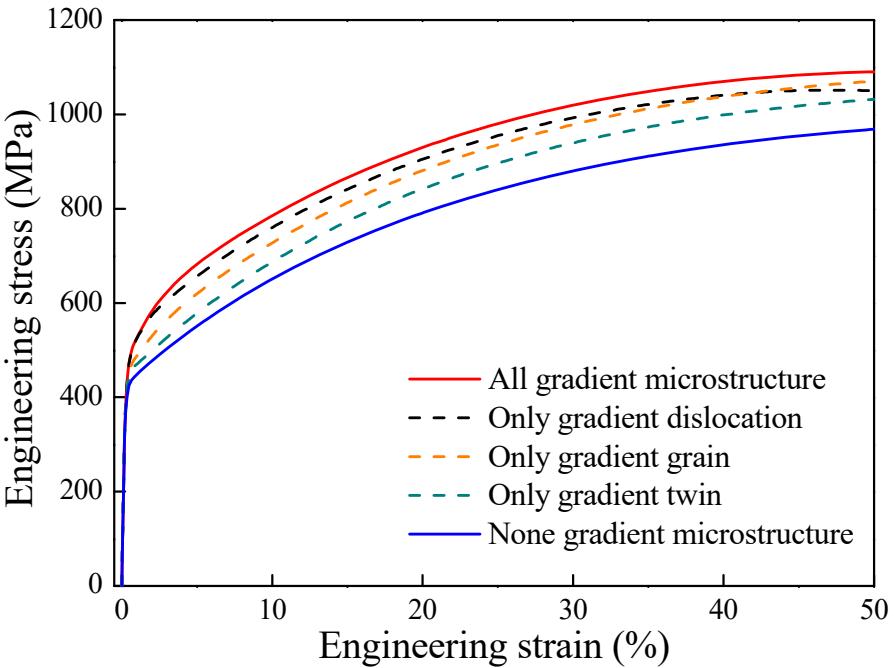
4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



梯度层位错密度演化



不同梯度结构的力学响应


$$\sigma_{\text{for}} = \alpha M G b \sqrt{\rho}$$

Layer1
林位错强化增加1.24倍
Layer9
林位错强化增加2.86倍

梯度位错结构有利于强度提升。
梯度晶粒和孪晶结构有利于应变硬化。
梯度混合结构的力学性能优于任一组分。

4.2 梯度结构材料的强韧行为研究



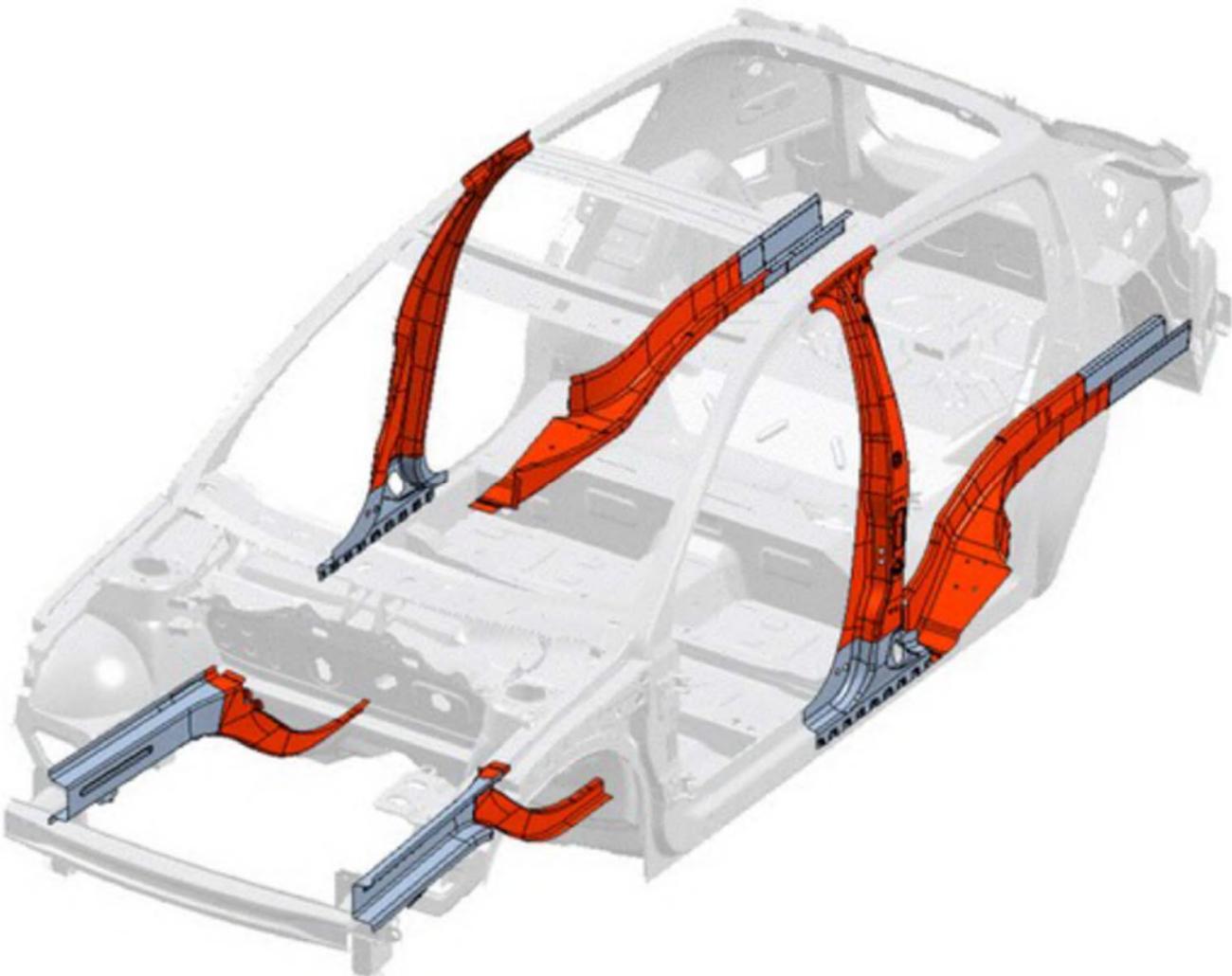
结论

1. 发展的晶体塑性本构模型可以合理描述梯度纳米结构材料的单拉力学响应。
2. 本构模拟有助于进一步揭示梯度纳米结构材料强韧性匹配的内在机制，指导梯度结构材料的优化设计。
3. 如何限制表层纳米晶应变局域化的产生，对提升梯度纳米结构材料的韧性有显著意义。

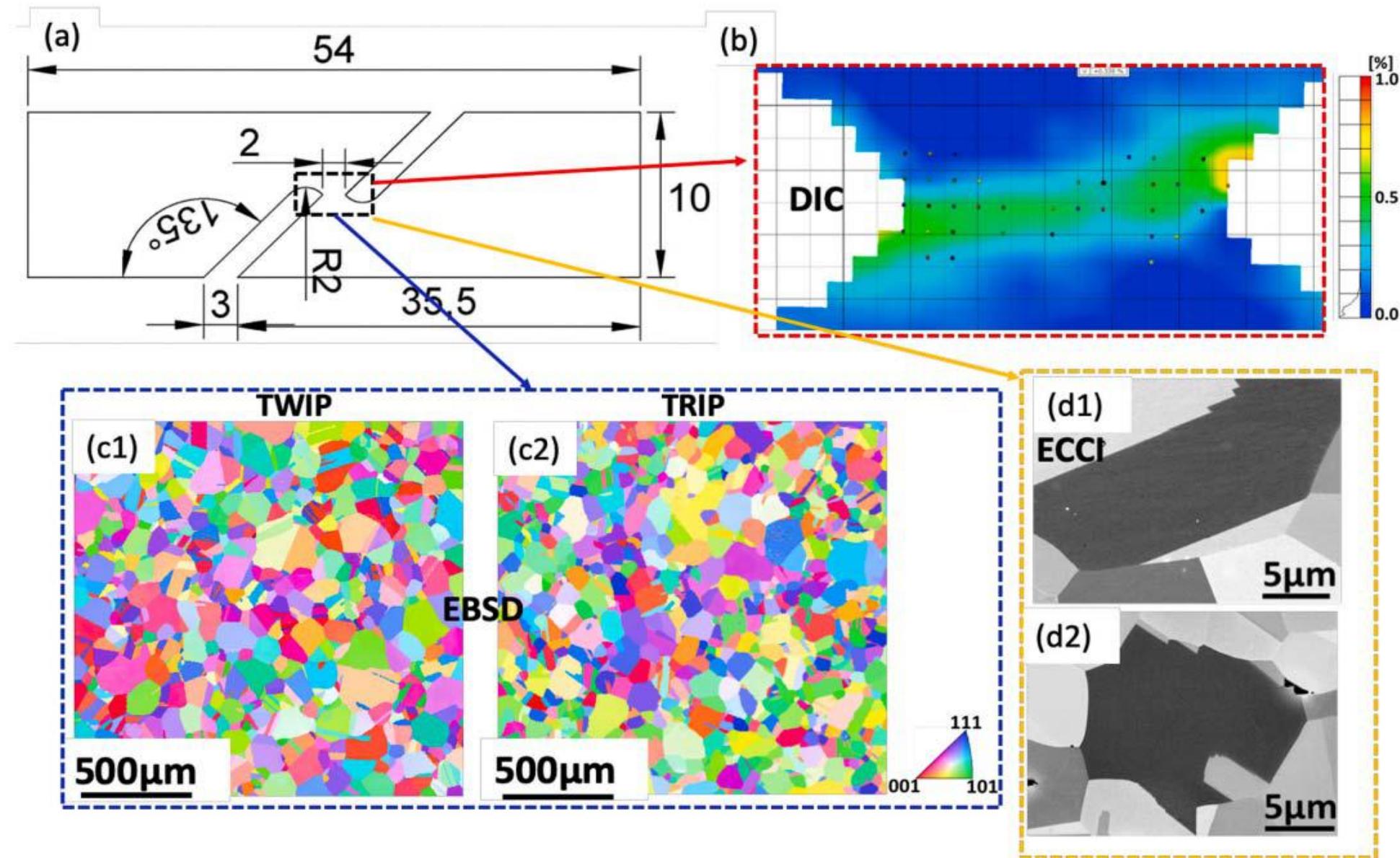
4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



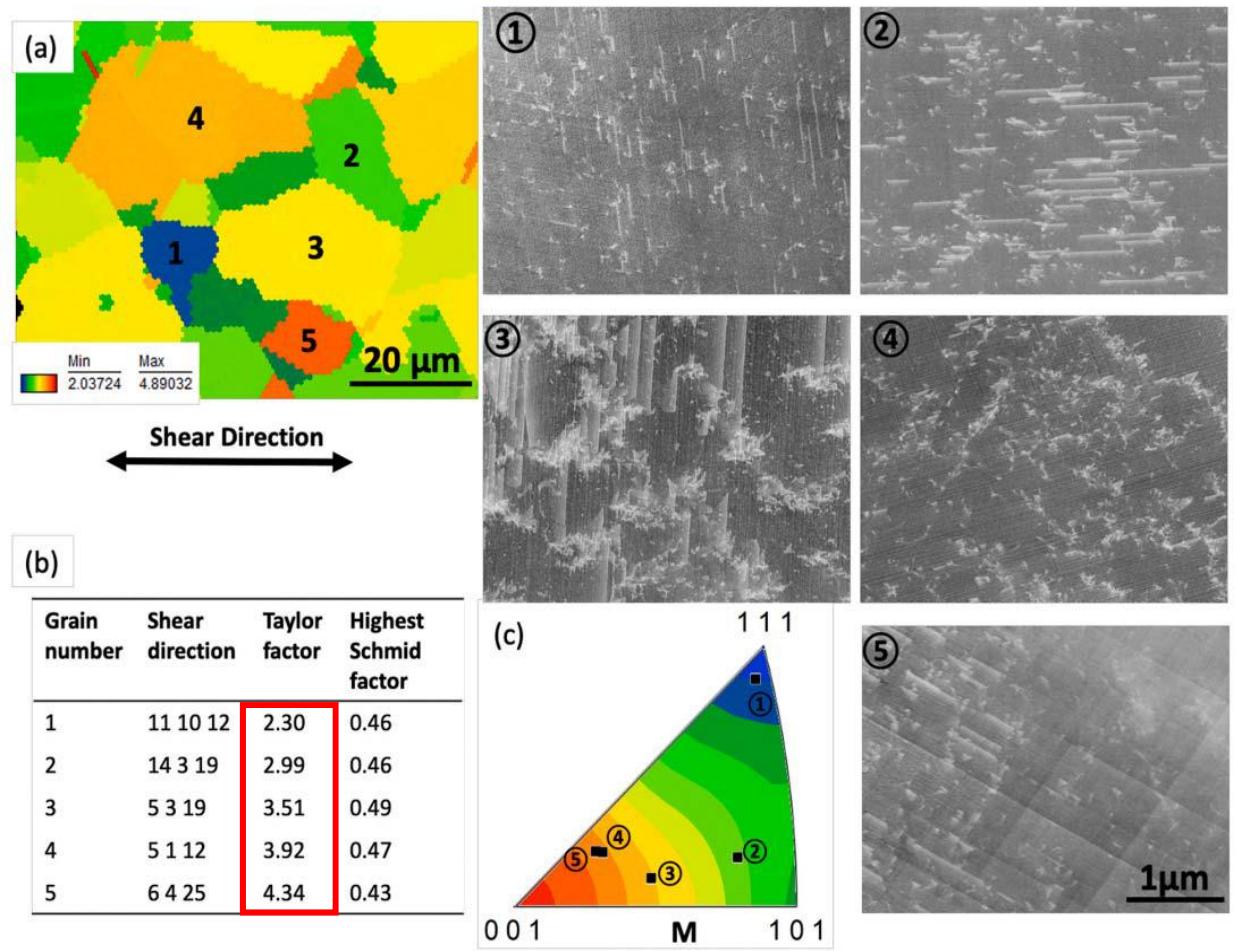
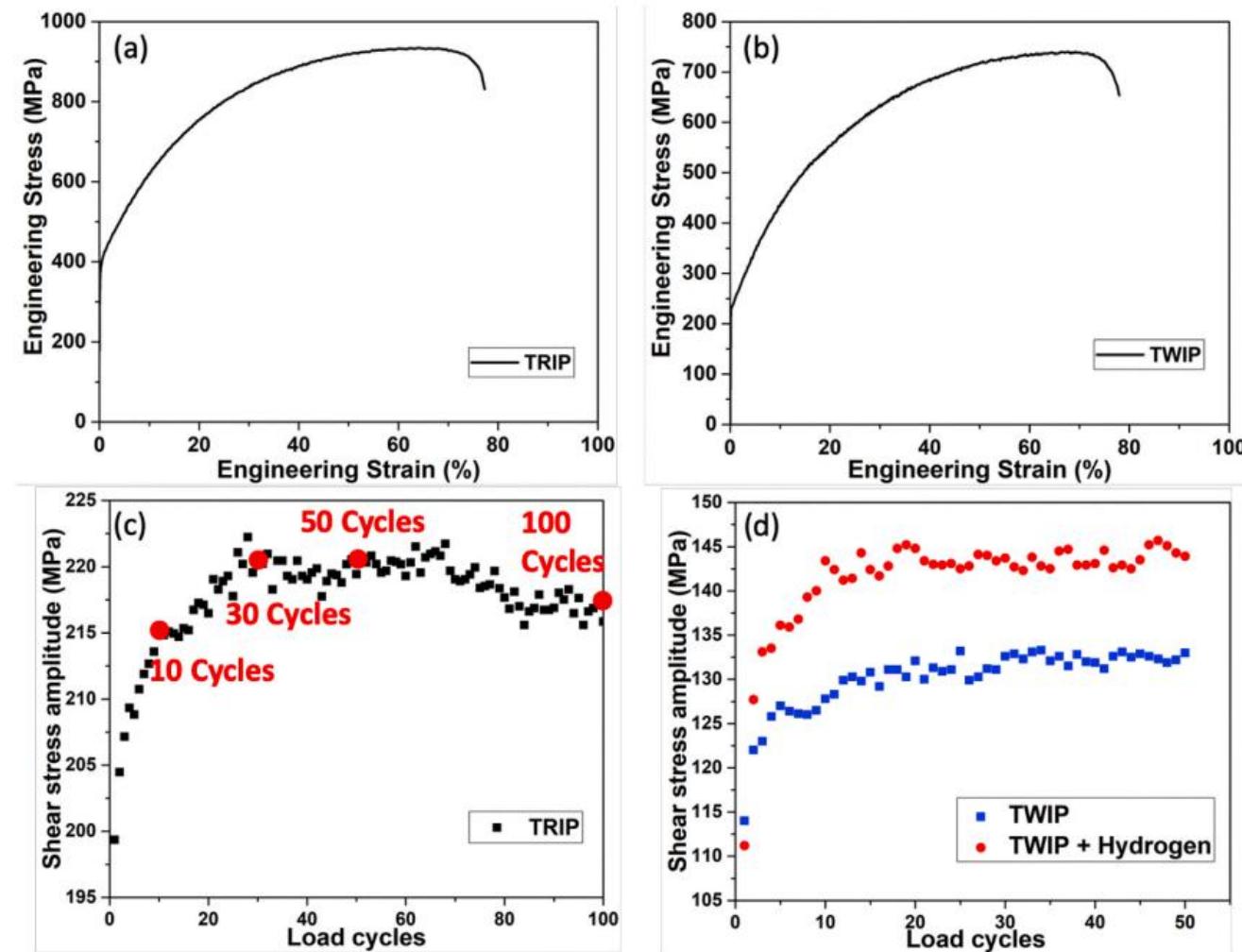
TRIP钢在汽车中的应用



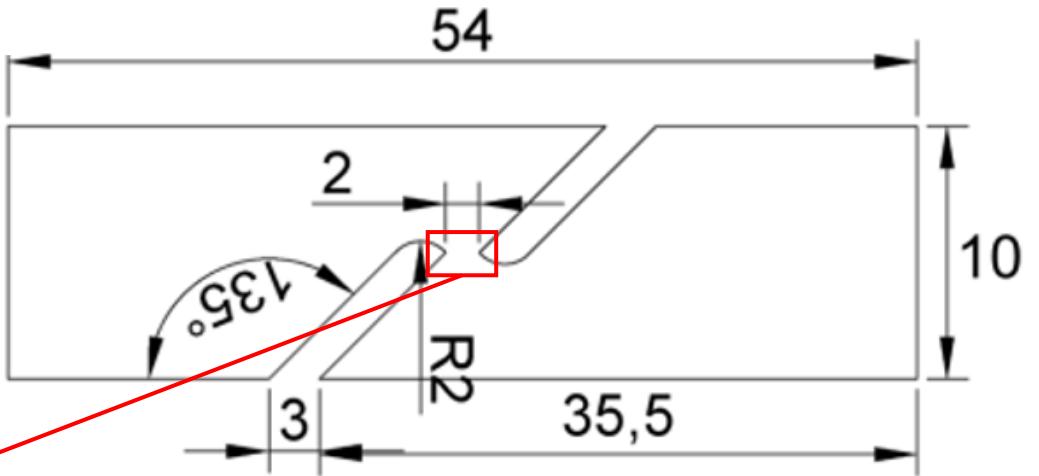
4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



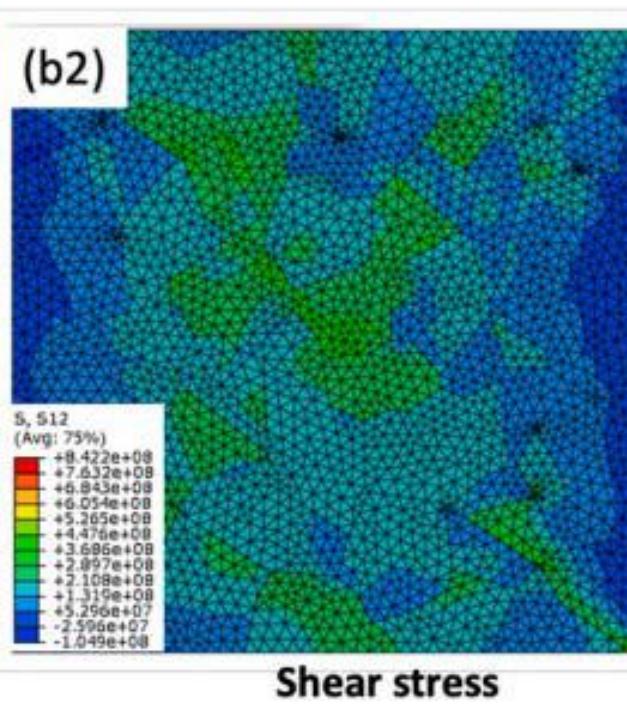
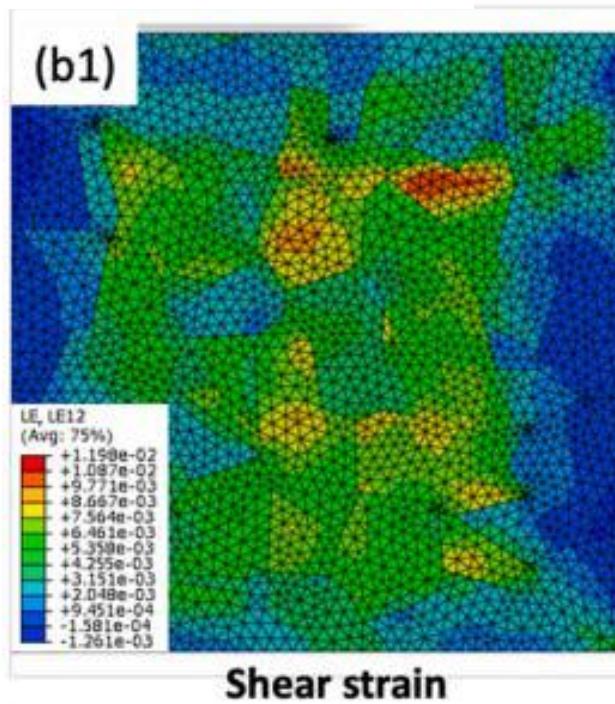
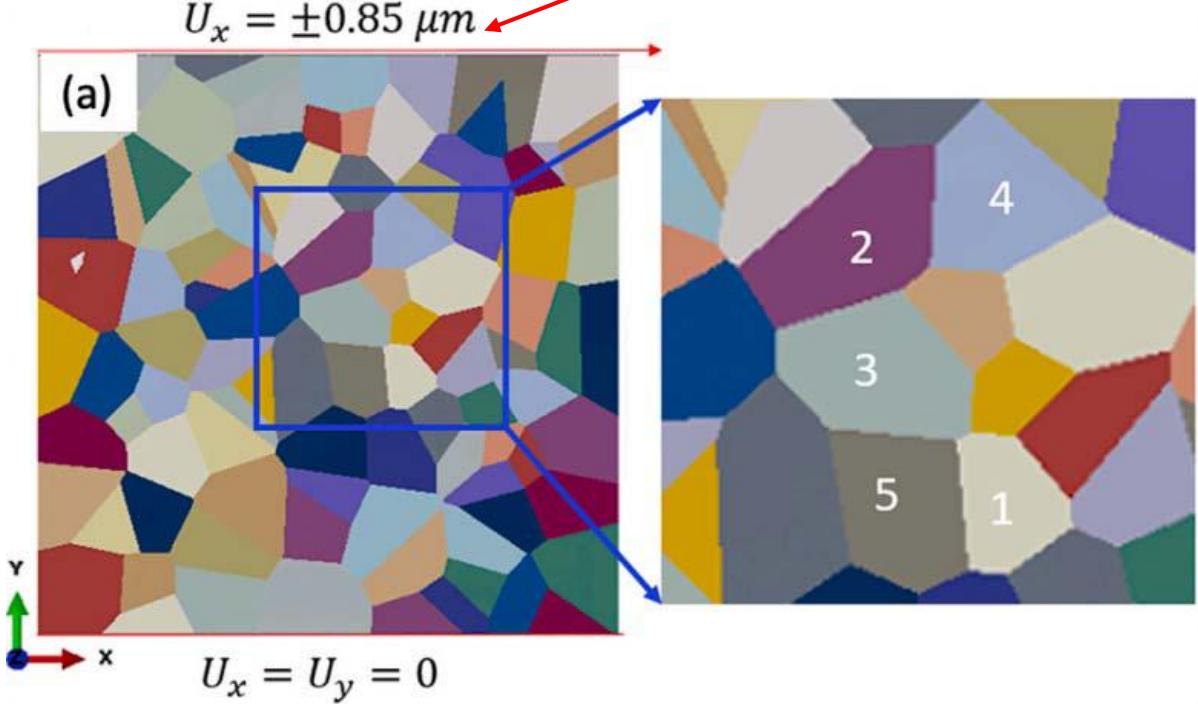
4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



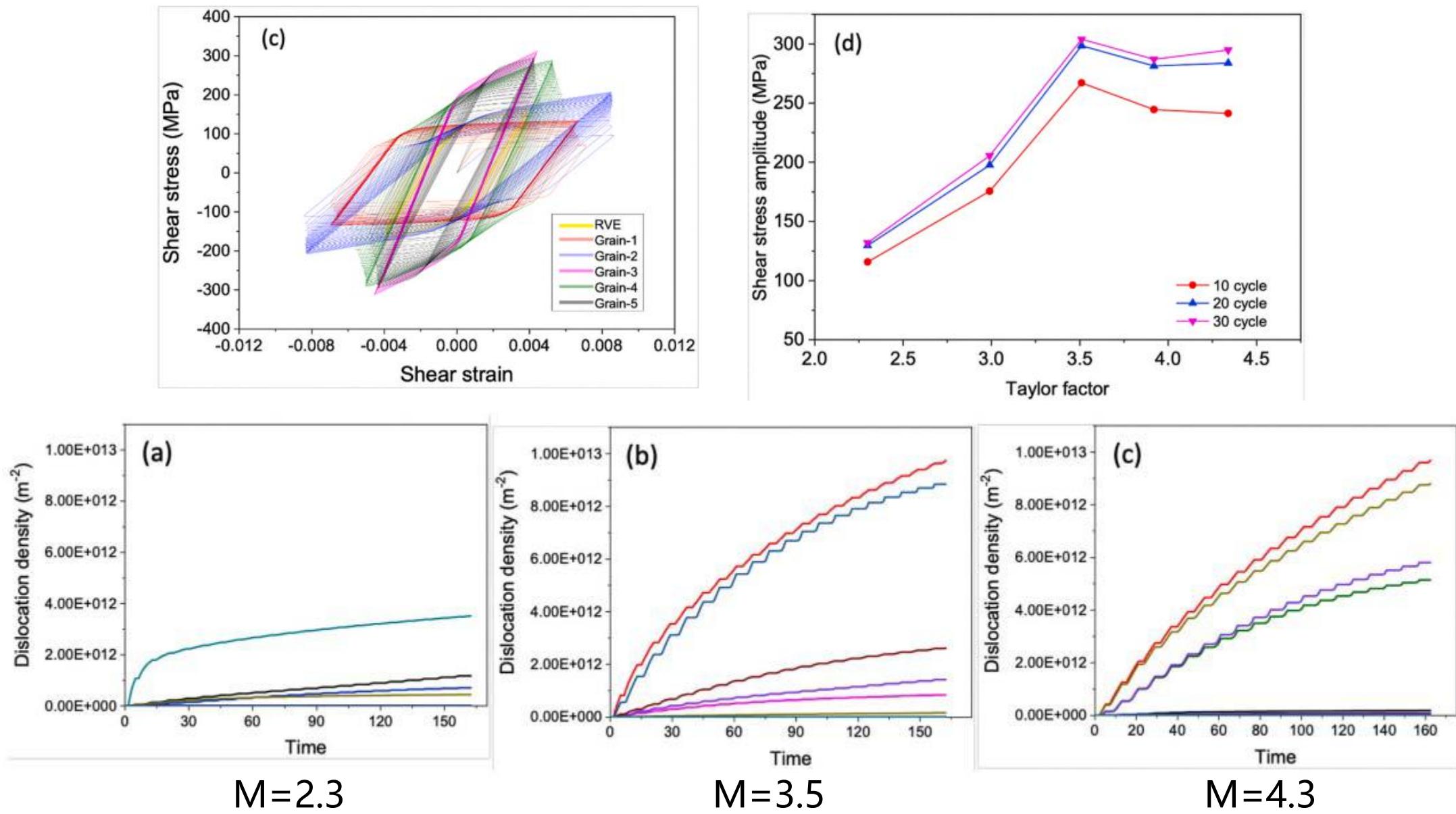
4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



$$U_x = \pm 0.85 \mu m$$



4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为

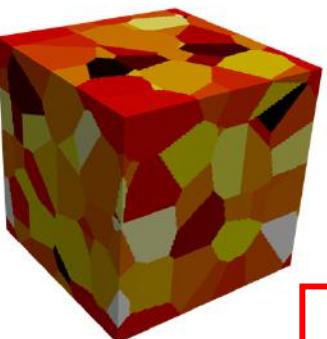


4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

1. 必须的配置文件



RVE: 晶粒信息、节点信息、单元信息

几何模型的描述

加载条件的定义

材料属性文件

$$\dot{\bar{F}} = 10^{-3} s^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$

```
### Material parameters ###
lattice_structure fcc
C11 175.0e9
C12 115.0e9
C44 135.0e9
grainsize 1.370e-5
SolidSolutionStrength 1.410e8

trans_lattice_structure hcp
C11_trans 242.3e9
C12_trans 117.7e9
C13_trans 45.39e9
C33_trans 315.0e9
C44_trans 45.5e9
```

Parts have fixed names
Homogenization
Phase
Microstructure
Texture
Crystallite

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为

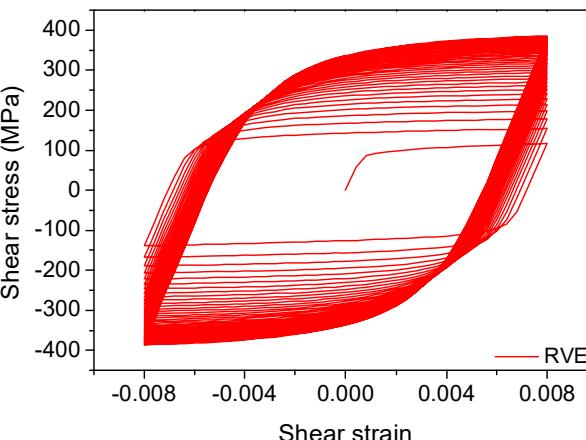


谱求解器模拟详解

1. 后处理工具

获得应力、应变等响应
TXT文本格式的数据

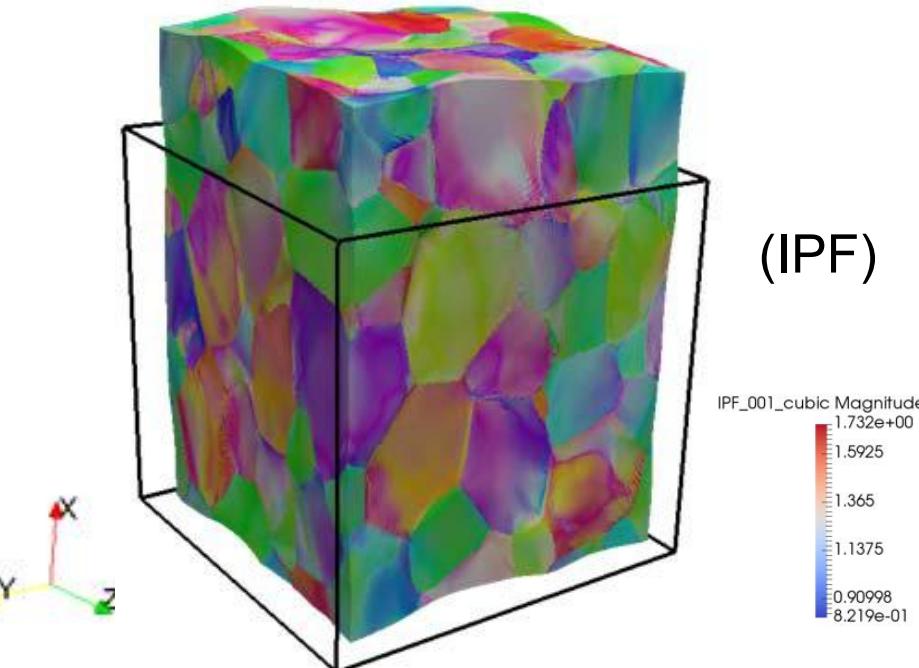
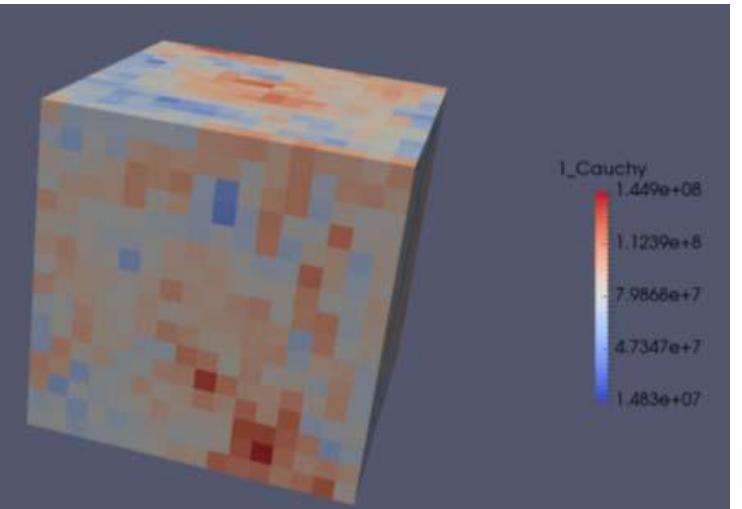
python commands



Low resolution & High resolution

2. 可视化处理工具

可视化: Paraview

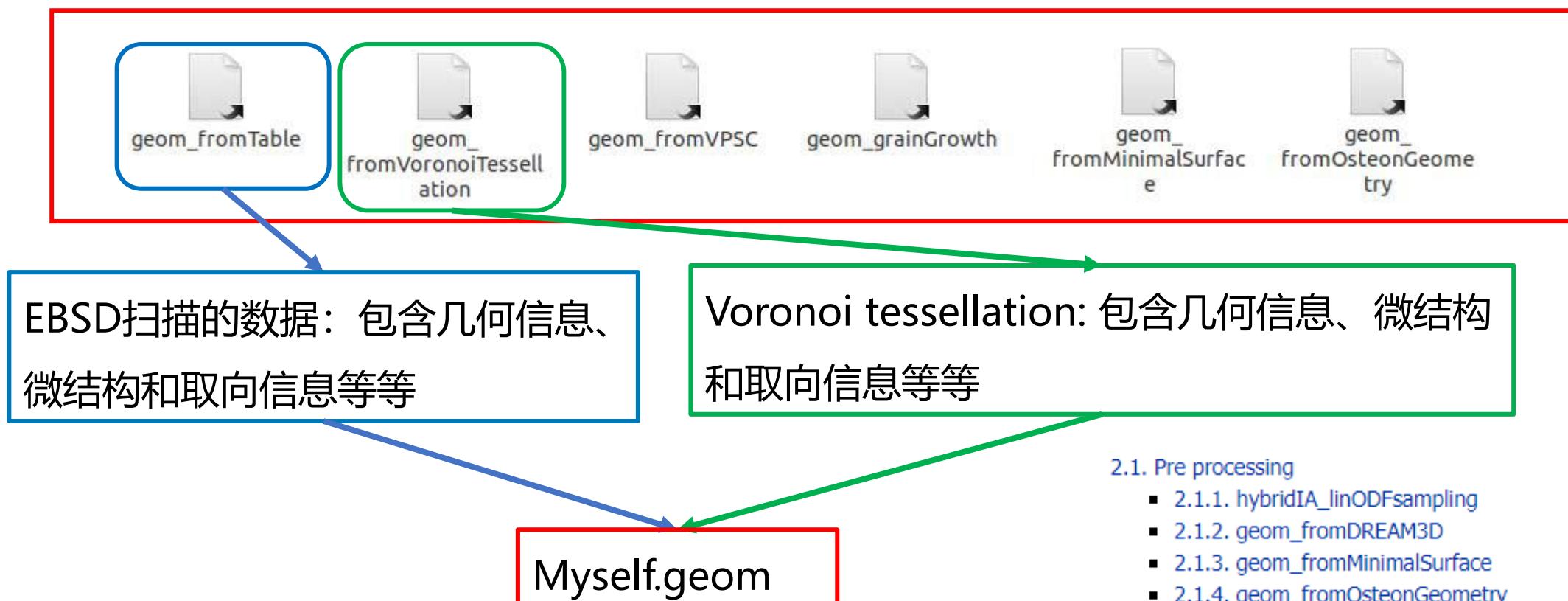


4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

几何文件：DAMASK内置多个模块支持的几何文件的生成形式



4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

几何文件: Example for Myself.geom

```
$ seeds_fromRandom -N 50 --grid 40 40 1 > Myself.seeds
```

指定种子点写入目标文件

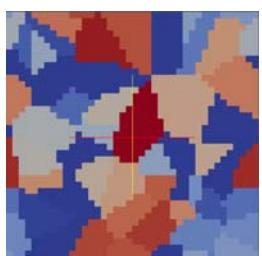
指定晶粒数目: 50

指定几何模型X、Y、Z: 三个方向的网格数目

```
$ geom_fromVoronoiTessellation -g 40 40 1 -s 40 40 1 < Myself.seeds > Myself.geom
```

指定几何模型X、Y、Z: 三个方向的具体尺寸比例

将种子文件写入几何文件



Paraview

得到: Myself.vtr

geom_check Myself.geom

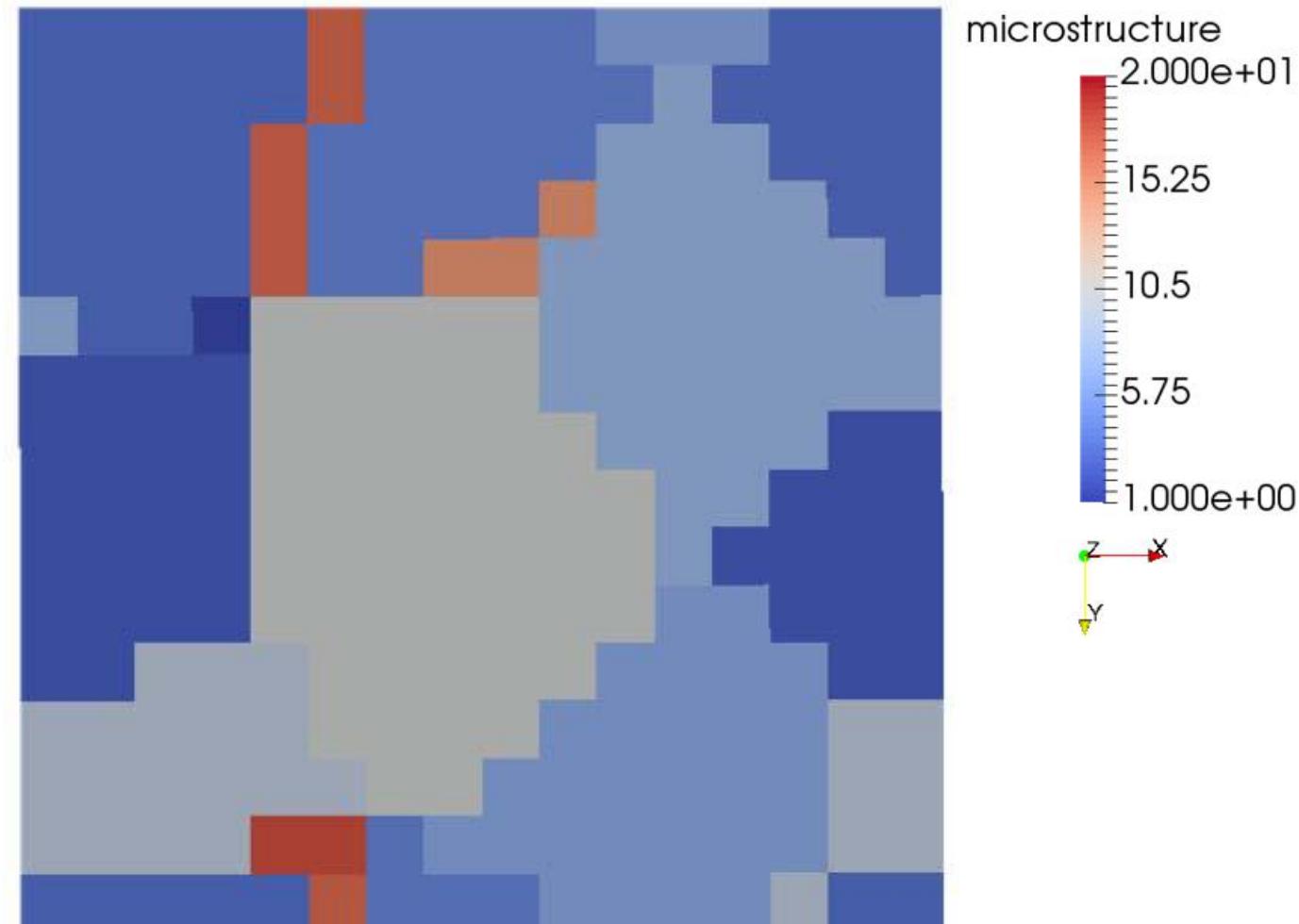


4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

3	3	3	3	3	17	4	4	4	4	6	6	6	3	3	3	3
3	3	3	3	3	17	4	4	4	4	4	7	3	3	3	3	3
3	3	3	3	17	4	4	4	4	4	7	7	7	3	3	3	3
3	3	3	3	17	4	4	4	4	15	7	7	7	7	3	3	3
3	3	3	3	17	4	4	15	15	7	7	7	7	7	7	7	3
7	3	3	1	10	10	10	10	10	7	7	7	7	7	7	7	7
2	2	2	2	10	10	10	10	10	7	7	7	7	7	7	7	7
2	2	2	2	10	10	10	10	10	10	7	7	7	7	2	2	2
2	2	2	2	10	10	10	10	10	10	7	7	2	2	2	2	2
2	2	2	2	10	10	10	10	10	10	10	7	2	2	2	2	2
2	2	2	2	10	10	10	10	10	10	10	6	6	2	2	2	2
2	2	9	9	9	10	10	10	10	10	6	6	6	6	2	2	2
9	9	9	9	9	10	10	10	10	6	6	6	6	6	9	9	9
9	9	9	9	9	9	10	10	6	6	6	6	6	6	9	9	9
9	9	9	9	18	18	4	6	6	6	6	6	6	6	9	9	9
3	3	3	3	3	17	4	4	4	6	6	6	6	9	3	3	3



几何文件：每个数字代表一个晶粒

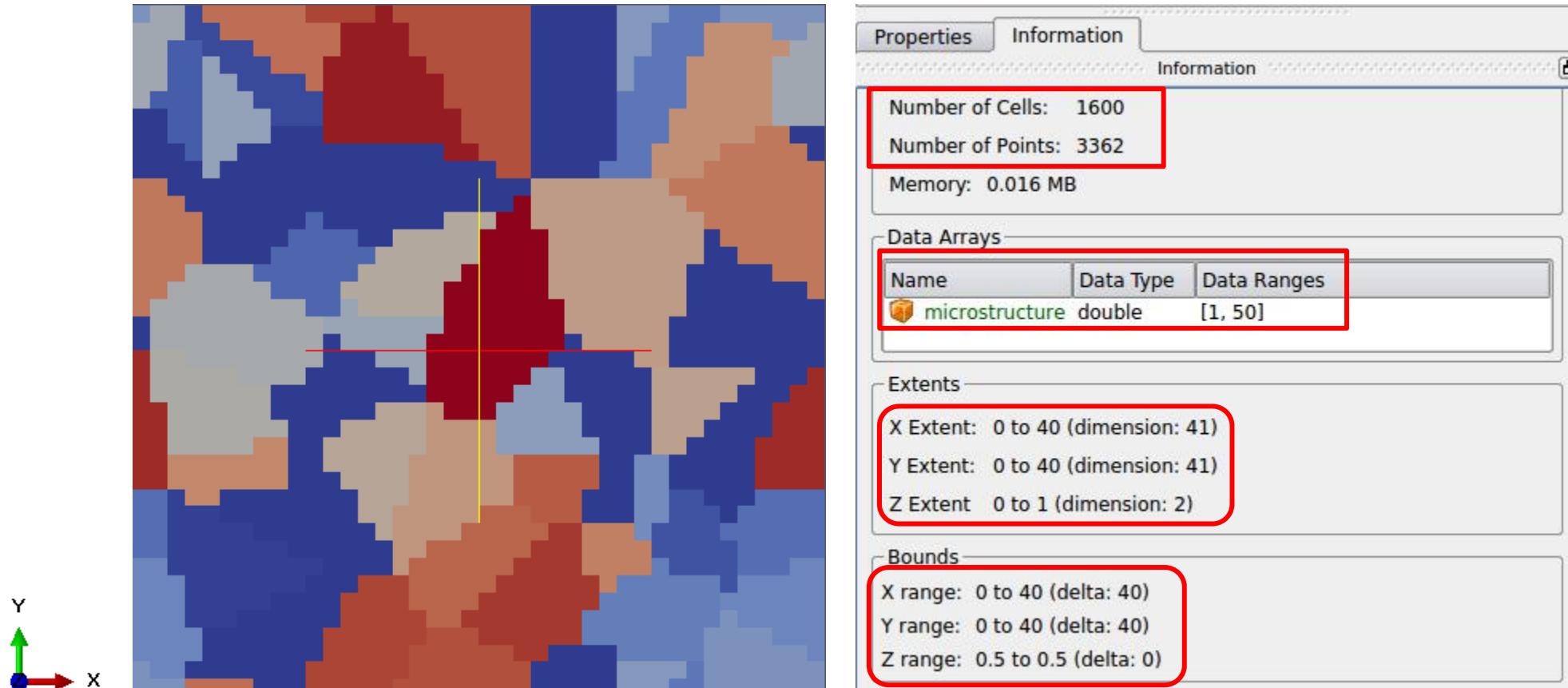
可视化：每个晶粒是一种颜色

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

Paraview: Myself.vtr



4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

加载文件: Example for tensionX.load

注意: 体积平均值 F/P

```
tensionX.load x  
1 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 *  
2 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress * * * * 0 * * * 0  
stress * * * * 0 * * * 0 time 40 incs 80 freq 1  
time 160 incs 320 freq 4
```

$$\dot{\bar{F}} = 10^{-3} s^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & * \end{bmatrix}$$
$$\bar{P} = 10^{-3} Pa \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & 0 & * \\ * & * & 0 \end{bmatrix}$$

time 40: 在当前应变率下的加载时间,
incs 80: 即在当前时间内有80个increment,
freq 1: 储存数据的频率

*代表自由边界

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

加载文件：沿X方向的拉压循环

```
1 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress *** * 0 * * * 0 time 8 incs 80 freq 4  
2 fdot -1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress *** * 0 * * * 0 time 16 incs 160 freq 4  
3 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress *** * 0 * * * 0 time 16 incs 160 freq 4
```

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix} \Rightarrow [1 \ 2 \ 3 \ 4 \ 5 \ 6 \ 7 \ 8 \ 9]$$

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

加载文件：沿X方向的单轴拉伸

```
1 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress * * * * 0 * * * 0 time 40 incs 80 freq 1  
2 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress * * * * 0 * * * 0 time 260 incs 520 freq 4
```

加载文件：沿X正向以0.001加载40s,保存数据点80个，继续以相同的应变率加载260s，保存数据点130个。

加载文件：剪切模拟

```
1 fdot 0 0 0 1e-3 0 0 0 0 0 0 stress * * * * * * * * time 2 incs 80 freq 4
```

$$\dot{\bar{F}} = 10^{-3} s^{-1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

加载文件需要注意的问题：

1. DAMASK中的加载以及输出数据都是体积平均值
2. 定义混合边界条件时，应力和应变必须是互斥的

```
Fdot 0.0 0.0 * 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 0.0 P * * * * 0.0 * * * * * * t 10.0 incs 40
```

```
Fdot 1.0e-4 0.0 0.0 0.0 * 0.0 0.0 0.0 0.0 P * * * * * 0.0 * * * * * * t 10.0 incs 40
```

3. “Fdot” 张量：变形梯度率张量
4. “F” :变形梯度率张量
5. “P” :第一 Piola-Kirchhoff 应力

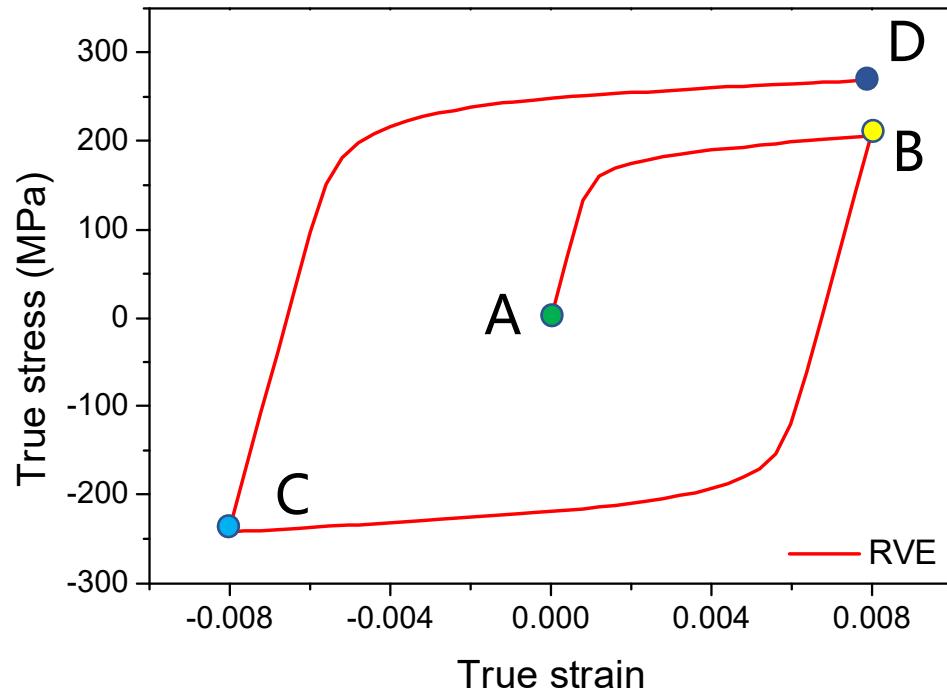
4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

加载文件：沿X方向的拉压循环 tensionX.load

```
1 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress *** * 0 * * * 0 time 8 incs 80 freq 4  
2 fdot -1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress *** * 0 * * * 0 time 16 incs 160 freq 4  
3 fdot 1.0e-3 0 0 0 * 0 0 0 * stress *** * 0 * * * 0 time 16 incs 160 freq 4
```



加载文件：

第一行：正向的拉伸应变为 0.008，对应A-B段

第二行：反向的压缩应变为 0.016，对应B-C段

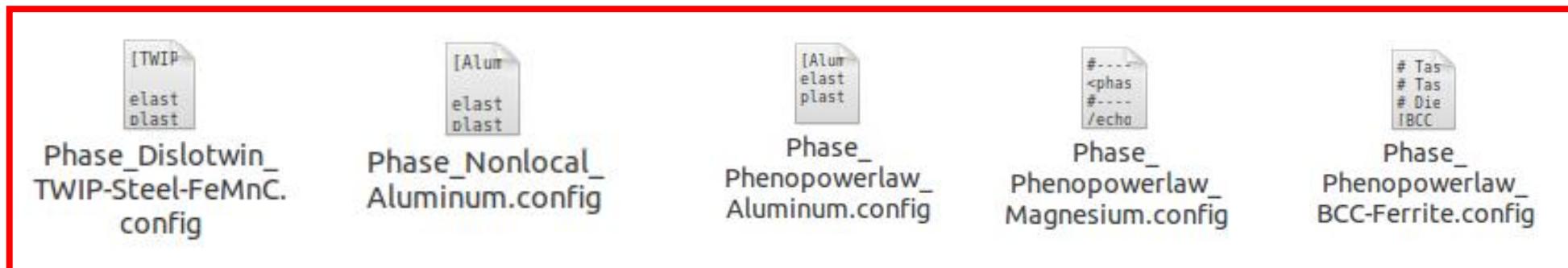
第三行：正向的拉伸应变为 0.016，对应A-B段

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

材料属性文件：MAMASK中内置了多种本构模型的材料文件



```
#-----#
<homogenization>
#-----#
[SX] type none
#-----#
<crystallite>
#-----#
[almostAll]
(output) phase
(output) texture
#-----#
<phase>
#-----#
/echo/
[TWIP-FeMnC]
#-----#
<microstructure>
#-----#
[Grain01]
crystallite 1
#-----#
<texture>
#-----#
[Grain01]
(gauss) phil 23.5846
```

材料文件由五个部分构成：具有固定的名字（关键字）

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

材料文件：

- 必须命名为 material.config
- 包含<Parts> 和 [Sections]
<PartA>
[section1]
....
[section2]
....
<PartB>
[section1]
...

```
#-----#
<phase>
#-----#
/echo/
[TWIP-FeMnC]
elasticity          hooke
plasticity         dislotwin
### Material parameters ###
lattice_structure   fcc
C11                 175.0e9
C12                 115.0e9
C44                 135.0e9
grainsize           1.780e-5
SolidSolutionStrength 0.6510e8
```

弹性部分：经典的
hooke定律

塑性部分： dislotwin
模型

指定晶体结构和对应
的弹性常数

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为

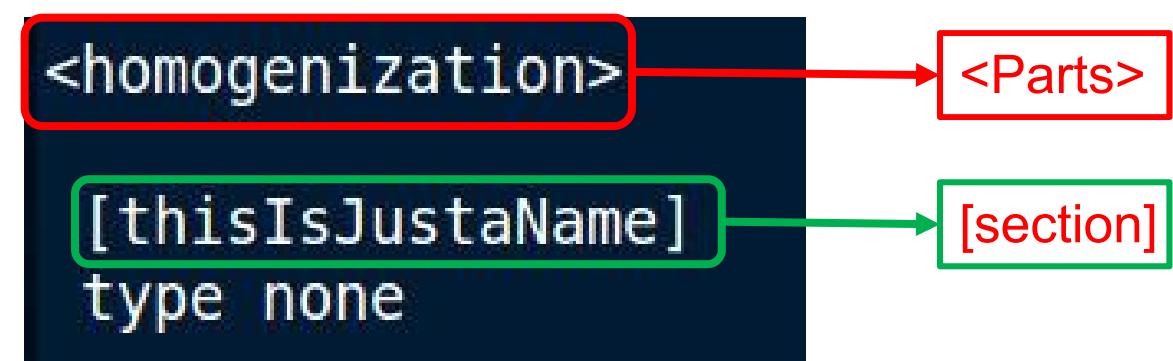


谱求解器模拟详解

材料文件：

- <Parts>具有固定的关键词

- Homogenization
- Phase
- Microstructure
- Texture
- Crystallite



- 每个<Parts>都必须存在并且至少包含一个[section]

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

求解命令：



```
zjf@ubuntu: ~/DAMASK/examples/SpectralMethod/grain-50/grain20-tensile
error divergence =      1.92 (1.45E+05 / m, tol = 7.57E+04)
error stress BC =      0.00 (2.23E+03 Pa, tol = 1.51E+06)

=====
Increment 2/600-1/1 @ Iteration 001≤017≤250

deformation gradient aim =
  1.0010000   0.0000000   0.0000000
  0.0000000   0.9996611   0.0000000
  0.0000000   0.0000000   0.9997208

... evaluating constitutive response .....
```

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

后处理命令：

postResults Myself_tensionX.spectralOut --cr f,p --co edge_density --co twin_fraction

使用关键词：**postResults**对结果文件**Myself_tensionX.spectralOut** 做数据处理

addStrainTensors Myself_tensionX.txt --left –logarithmic

输出对数应变

addCauchy Myself_tensionX.txt

输出应力

addMises -e 'ln(V)' -s Cauchy Myself_tensionX.txt

输出等效应力和等效应变

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

后处理命令：分步处理命令

```
postResults Myself_tensionX.spectralOut --increments --range 0 200 100 --separation x,y,z --split  
--cr texture,f,p,orientation,grainrotation
```

按0到200个increments，每个100 increments输出一个数据文件：

```
--cr 输出晶粒结果
```

```
cd postProc/
```

```
addStrainTensors Myself_tensionX_inc100.txt --left -logarithmic
```

```
addCauchy Myself_tensionX_inc100.txt
```

```
addDisplacement --nodal Myself_tensionX_inc100.txt vtk_rectilinearGrid
```

```
Myself_tensionX_inc100.txt vtk_addRectilinearGridData -s
```

```
1_Cauchy,2_Cauchy,3_Cauchy,4_Cauchy,5_Cauchy,6_Cauchy,1_orientation,2_orientation,3_orient  
ation Myself_tensionX_inc100.txt --vtk Myself_tensionX_inc100_pos\cell.vtr
```

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



每个人在自己的目录下：有两个文件夹及其部分文件夹：**grain20-tensile**和**grain20-cycle**，分别对应单拉和循环，进入**grain20-tensile**，执行**. Damask_run3.sh**，得到对应的结果文件：**Myself_tension.txt** 得到RVE的应力应变响应数据，

```
[train1@ln01 grain20-cycle]$ cat damask_run3.sh
#!/bin/bash
#SBATCH -J 'grain20-tensile'
#SBATCH -p cnmix
#SBATCH -N 1
#SBATCH -o stdout.%J
#SBATCH -e stderr.%J
#SBATCH --no-queue
#SBATCH --ntasks-per-node=6

source /apps/soft/DAMASK-v2.0.1/DAMASK_env.sh
export PETSC_DIR=/apps/src/petsc-3.6.4/
export PETSC_ARCH=arch-linux2-c-opt
export PATH=/apps/src/petsc-3.6.4/arch-linux2-c-opt/bin:$PATH
export PATH=/apps/lib/anaconda/anaconda3/e5/bin:$PATH
export DAMASK_NUM_THREADS=6

/apps/soft/DAMASK-v2.0.1/code/DAMASK_spectral.exe --load tensionX.load --geom Myself.geom
module load lib/anaconda/anaconda2/config
postResults Myself_tensionX.spectralOut --cr f,p --co edge_density --co dipole_density --co twin_fraction

cd postProc

addStrainTensors Myself_tensionX.txt --left --logarithmic

addCauchy Myself_tensionX.txt

addMises -e 'ln(V)' -s Cauchy Myself_tensionX.txt[train1@ln01 grain20-cycle]$
```

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



每个人在自己的目录下：进入grain20-tensile，执行. Damask_run2.sh，得到对应的结果文件：Myself_tension.txt 得到不同应变下的可视化结果，

```
#!/bin/bash
#SBATCH -J 'grain20-tensile'
#SBATCH -p cnmix
#SBATCH -N 1
#SBATCH -o stdout.%J
#SBATCH -e stderr.%J
#SBATCH --no-queue
#SBATCH --ntasks-per-node=6

source /apps/soft/DAMASK-v2.0.1/DAMASK_env.sh
export PETSC_DIR=/apps/src/petsc-3.6.4/
export PETSC_ARCH=arch-linux2-c-opt
export PATH=/apps/src/petsc-3.6.4/arch-linux2-c-opt/bin:$PATH
export PATH=/apps/lib/anaconda/anaconda3/e5/bin:$PATH
export DAMASK_NUM_THREADS=6

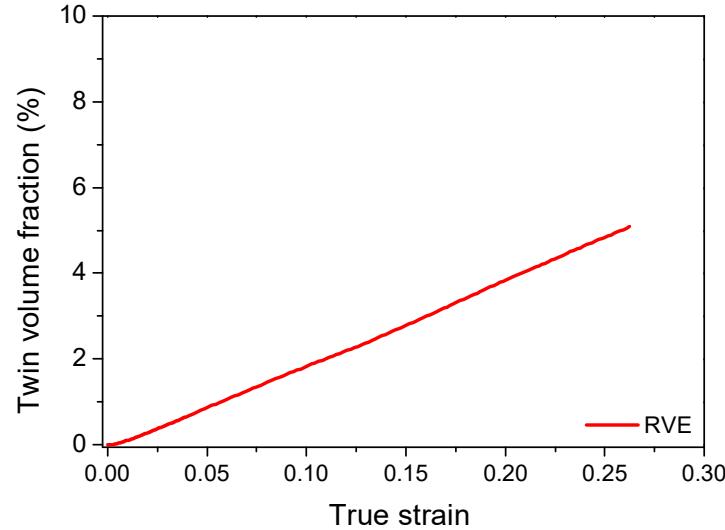
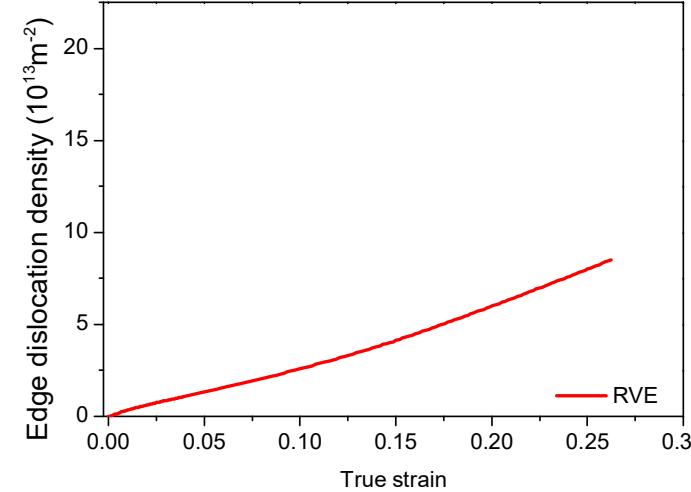
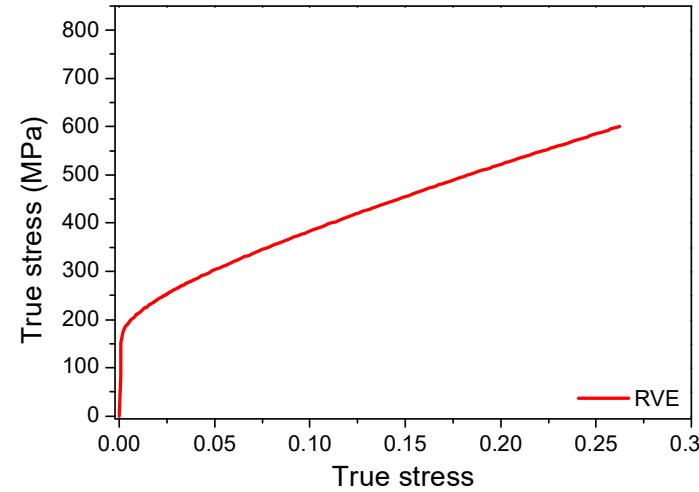
/apps/soft/DAMASK-v2.0.1/code/DAMASK_spectral.exe --load tensionX.load --geom Myself.geom
module load lib/anaconda/anaconda2/config
postResults Myself_tensionX.spectralOut --increments --range 0 200 100 --separation x,y,z --split --cr texture,f,p,orientation,grainrotation
cd postProc/
addStrainTensors Myself_tensionX_inc100.txt --left --logarithmic
addCauchy Myself_tensionX_inc100.txt
addDisplacement --nodal Myself_tensionX_inc100.txt
vtk_rectilinearGrid Myself_tensionX_inc100.txt
vtk_addRectilinearGridData -s 1_Cauchy,2_Cauchy,3_Cauchy,4_Cauchy,5_Cauchy,6_Cauchy,1_orientation,2_orientation,3_orientation Myself_tensionX_inc100.txt --vtk Myself_tensionX_inc100_pos\cell\).vtr
[train1@ln01 grain20-cycle]$
```

4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为

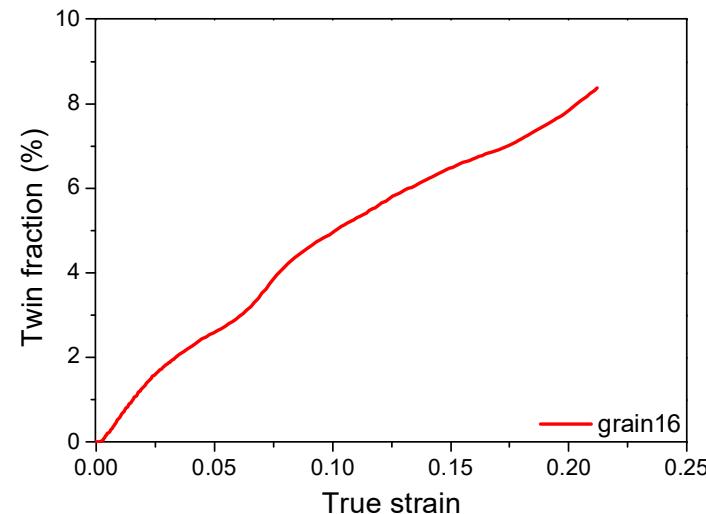
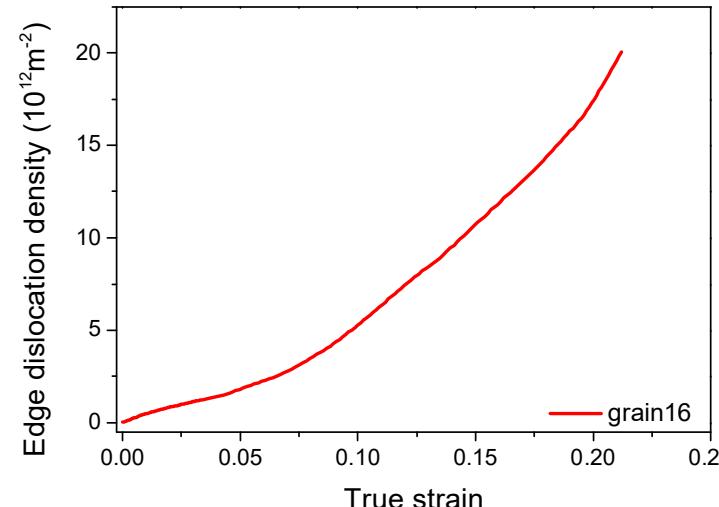
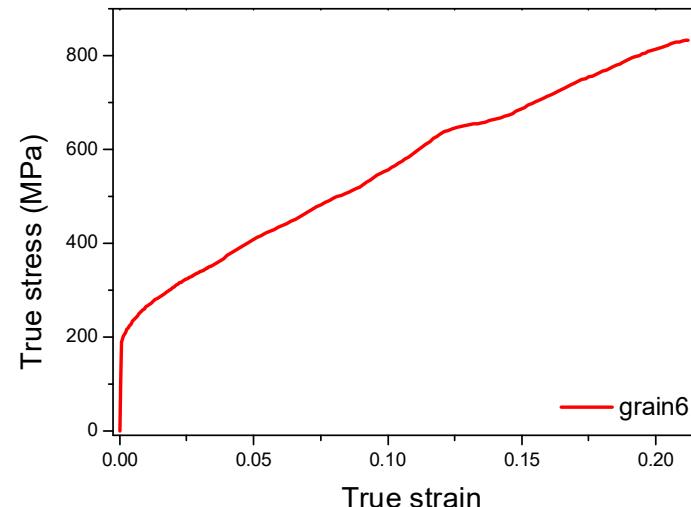


谱求解器模拟详解

RVE: 单拉响应、刃型位错密度、孪晶体积分数



grain16: 单拉响应、刃型位错密度、孪晶体积分数

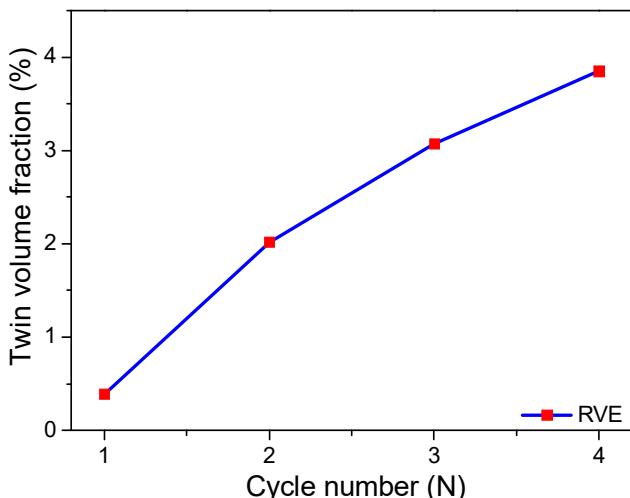
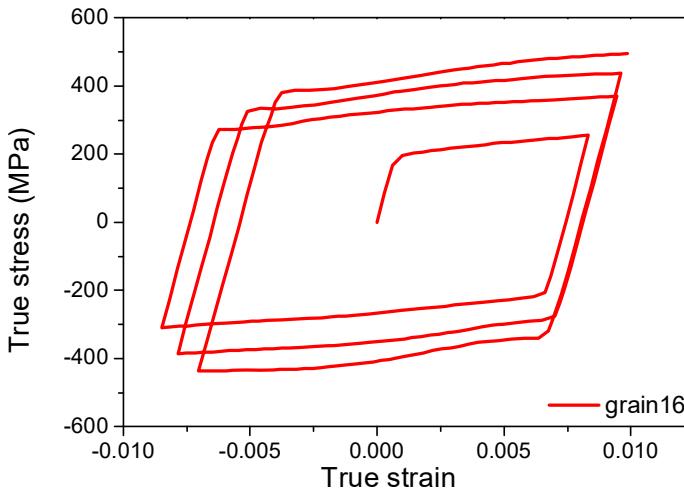
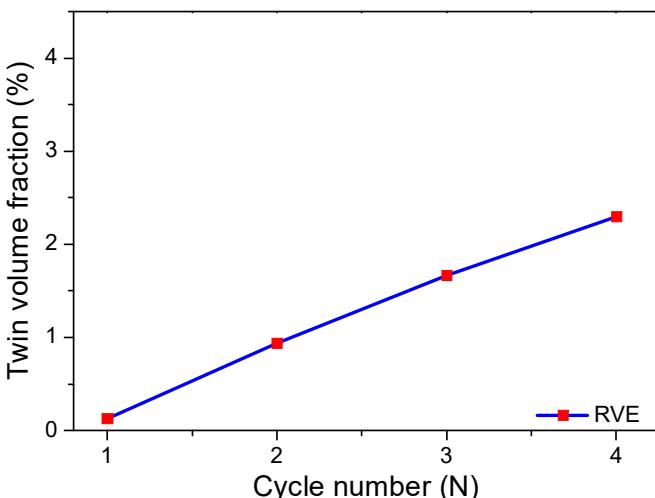
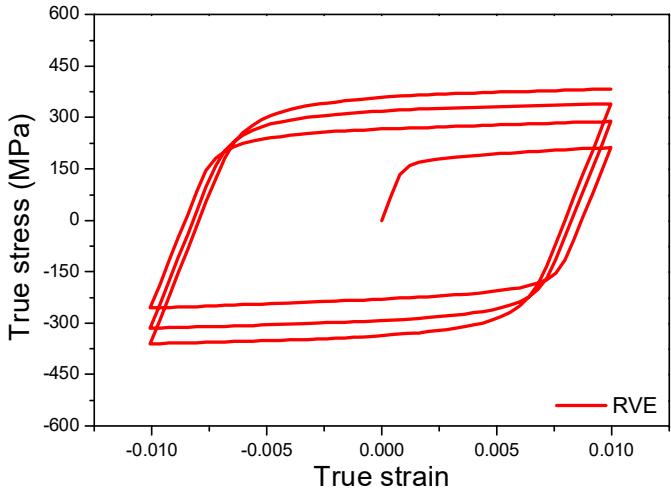


4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为



谱求解器模拟详解

RVE: 循环响应、孪晶体积分数 grain16: 循环响应、孪晶体积分数

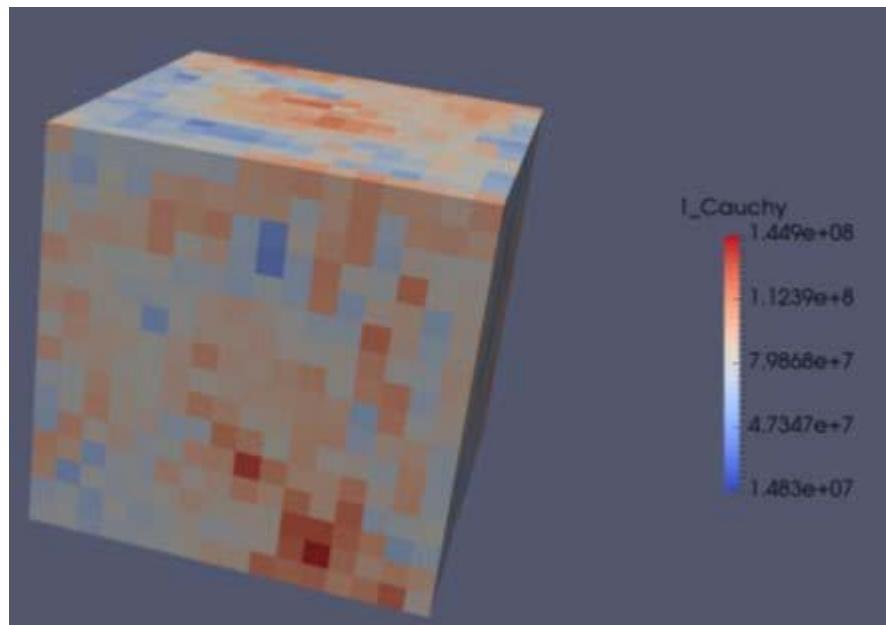


4.3 高性能TWIP钢/TRIP钢的循环塑性行为

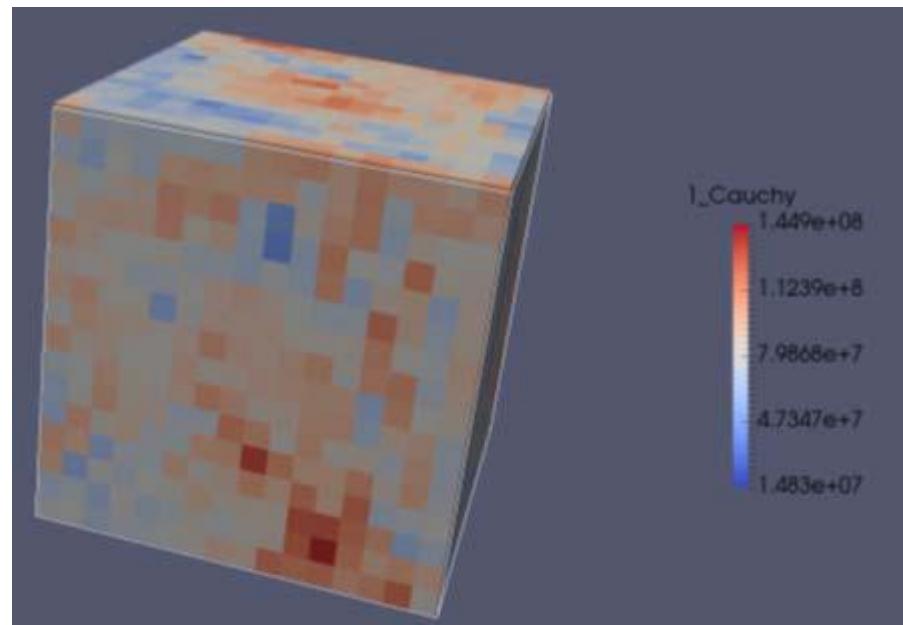


谱求解器模拟详解

可视化处理：使用命令调用内置程序，将Cauchy应力数据生成.vtk文件，使用Paraview打开



Cauchy等效应力云图



Cauchy等效应力云图（变形前后的对比图）



谢谢！