

增材制造钛合金的裂纹扩展行为的晶体塑性有限元分析



任斯远,王凯,刘斌超,鲍蕊*

北京航空航天大学 航空科学与工程学院, 北京 100191

摘要: 本文通过 Abaqus 和 MATLAB, 结合扩展有限元建立了一种基于 Voronoi 图的晶体弹塑性有限元模型。为验证该模型, 模拟了晶体取向对激光熔化沉积 TC18 静力性能和疲劳裂纹扩展的影响。结果表明, 该模型能够重现试验现象, 并一定程度上揭示产生这种现象的原因。能够有效描述金属晶体的各向异性响应, 并能为增材制造钛合金疲劳裂纹扩展分析和以提升损伤容限性能为目的的工艺优化提供有益参考。

关键词: 激光熔化沉积; 晶体塑性; 疲劳; 扩展有限元; 裂纹扩展

中图分类号: V252.2

文献标识码: A

DOI: 10.19452/j.issn1007-5453.2019.09.011

钛合金发展自 20 世纪 50 年代, 得益于其优良的性能如高比强度和良好的耐腐蚀性, 是制造飞机主承力结构的重要材料。然而, 与铝合金和高强度钢相比, 难加工性以及由此带来的高制造成本一直是制约钛合金在飞机结构中更广泛应用的主要因素。钛合金大型构件增材制造技术是钛合金整体飞机结构件革命性的突破, 为结构轻量化和低成本化带来进一步可能^[1]。

激光熔化沉积(LMD)技术是解决大型钛合金结构制造的增材制造技术, 其具有加工快捷、原料利用率高等优点, 并且在加工复杂结构时具有显著优势^[2]。通过该种技术加工的航空整体结构件已在部分次承力结构上实现应用^[3,4]。由于激光增材制造的技术特性, 受高温梯度和高冷却速度的影响, LMD 钛合金可能会在组织上呈现异于传统锻造钛合金的非均匀排布特征^[5], 当然, 也可以根据结构受力需要, 通过工艺控制, 实现结构材料性能的优化, 调整材料组织排布。但在这种背景下, 基于传统均匀材料的断裂力学理论的裂纹扩展分析能否仍适用于该类型结构的损伤容限的评定, 应用传统理论的损伤容限分析精度是否满足要求或是否有进一步提高分析精度的可能, 这些问题有待进一步研究。

对 LMD 钛合金疲劳裂纹扩展的研究多集中于该材料与

锻件、铸件的性能对比^[6]、工艺参数对 LMD 钛合金材料性能的影响^[7], 也有部分文献对 LMD 钛合金微观组织对疲劳裂纹扩展的影响进行了试验观测和定性分析^[8]。本课题组对 LMD-TC11、TC18、TC21 等钛合金在横幅载荷、简单变幅载荷下的疲劳裂纹扩展行为进行了试验研究^[9-15], 试验表明, 柱状晶、近等轴晶的静力性能, 特别是塑性段的静力性能存在显著差别, 二者中的组织排布也显著不同, 从而导致裂纹沿不同方向扩展时扩展路径、扩展速率、裂纹闭合水平等的变化, 热影响带对疲劳裂纹扩展速率也存在影响, 试件厚度同样也对裂纹扩展行为有影响。获得试验验证的仿真方法也是研究材料组织的疲劳裂纹扩展影响的重要途径, 在仿真方面, 本课题组采用近场动力学方法(PD)^[16]和晶体塑性有限元方法(Crystal Plastic Finite Element Method, CPFEM)开展了研究, 在 PD 方法中, 发展了考虑材料组织的建模方法, 加入了考虑材料塑性的力函数模型, 提出了一种新的疲劳退化模型; 在 CPFEM 中, 发展了两种不同的晶体建模方式, 引入了扩展有限元, 实现了基于晶体塑性理论的疲劳裂纹动态模拟。本文主要阐述采用改进的 CPFEM 对 LMD-TC18 钛合金静力及裂纹扩展行为的研究, 着重探讨组织对疲劳裂纹扩展路径的影响, 以期为该类型结构的损伤容限分析提供参

收稿日期: 2019-08-15; 退修日期: 2019-08-23; 录用日期: 2019-08-30

基金项目: 国家自然科学基金(11672012)

*通信作者. Tel.: 010-82314957 E-mail: rbao@buaa.edu.cn

引用格式: Ren Siyuan, Wang Kai, Liu Binchao, et al. Crystal plastic finite element analysis of crack propagation behavior of additive titanium alloy[J]. Aeronautical Science & Technology, 2019, 30(09): 81-86. 任斯远, 王凯, 刘斌超, 等. 增材制造钛合金的裂纹扩展行为的晶体塑性有限元分析[J]. 航空科学技术, 2019, 30(09): 81-86.

考,并为增材制造工艺的优化提供依据。

1 晶体塑性理论

晶体变形可分为弹性与塑性两个部分,其中弹性部分由晶格畸变和刚体转动组成,其可由弹性力学方法给出精确解。塑性部分来源于滑移系的开动,存在位移间断,为了描述这种局部不连续的位移间断,在构建位移梯度时可采用描述连续介质变形的场变量变形梯度来衡量宏观晶体的塑性变形。

晶体塑性理论认为晶体的变形是塑性贡献部分 F^p 与弹性贡献部分 F^e 叠加的结果,如图1所示,总变形梯度张量可写为:

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

由于仅发生塑性变形时,滑移系方向不发生改变,故塑性部分可写为:

$$F^p = \sum_{a=1}^N (I + \gamma^{(a)} s_0^{(a)} \otimes m_0^{(a)}) \quad (2)$$

式中: $\gamma^{(a)}$ 为第 a 个滑移系上的累积切应变。

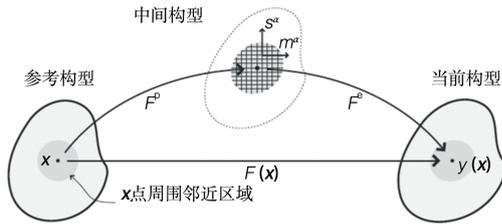


图1 变形的分解

Fig.1 Configuration deformation

对当前构型引入速度梯度张量:

$$L = \frac{\partial v}{\partial x} = F\dot{F}^{-1} = L^e + L^p \quad (3)$$

将速度梯度张量 L 做对称与反对称分解则得到旋率张量 W 和变形率张量 D 。旋率张量 W 和变形率张量 D 也可以分级为弹性变形和塑性变形两部分:

$$L = D + W$$

$$D = \frac{1}{2} (L + L^T) = D^e + D^p \quad (4)$$

$$W = \frac{1}{2} (L - L^T) = W^e + W^p$$

滑移系方向与滑移面法方向的变化速率为:

$$\dot{s}^{(a)} = L^e s_0^{(a)} = (D^e + W^e) s_0^{(a)}$$

$$\dot{m}^{(a)} = -m_0^{(a)} L^e = -m_0^{(a)} (D^e + W^e) \quad (5)$$

晶体塑性理论的本构方程为:

$$\bar{\sigma} = C:D - \sum_{a=1}^N (C:P^{(a)} + W^{(a)}\sigma - \sigma W^{(a)})\dot{\gamma}^{(a)} \quad (6)$$

式中: C 为弹性模量张量。

CPFEM 考虑了变形速率对材料的强化作用,本文采用

由 Asaro 和 Needleman^[17] 提出的针对单个滑移系的率相关指数形式动力法则,其以幂律方程的形式建立了计算单个滑移系切应变率 $\dot{\gamma}^{(a)}$ 的黏塑性公式:

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau^{(a)}) \quad (7)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为滑移系的参考塑性切应变率, $\tau^{(a)}$ 为分解切应力 (RSS), $g^{(a)}$ 为滑移系当前强度, m 为滑移的率灵敏度参数,其在 $m = 0, m = \infty$ 时对应率无关和黏弹性情况。

本文采用的硬化公式是由基于 C. Tome, G. Canova^[18] 提出的针对单个晶体的 Voce 硬化模型推导而来的:

$$h(\Gamma) = h_s + (h_0 - h_s + \frac{h_0 h_s \Gamma}{\tau_s}) e^{-\frac{h_0 \Gamma}{\tau_s}} \quad (8)$$

式中: h_0 为初始硬化模量, h_s 为饱和硬化模量, τ_s 为饱和切应力, Γ 为所有已激活滑移系的累积切应变之和。

2 扩展有限元的引入及有限元模型的建立

2.1 扩展有限元与断裂准则的定义

若要对激光熔化沉积 TC18 钛合金的疲劳裂纹扩展的模拟,则需要对裂纹的实时扩展进行计算和跟踪。传统有限元方法往往采用解绑节点约束和删除网格的形式对模型的裂纹进行更新,这种方法不仅需要对接尖处网格进行加密,在进行计算时每一增量步也需要对网格进行重新划分,计算量较大而且在赋予材料晶体塑性本构时也因裂尖处应力分布变得复杂而影响收敛性。而有别于传统有限元,扩展有限元法在对裂纹进行描述和跟踪时使用的方法是水平集法,这种方法独立于网格,故不需要对网格进行额外的加密和重新划分,效率较高。故本文将扩展有限元引入晶体塑性有限元方法中。

一般断裂准则除最大主应力准则外,在判断是否起裂和计算裂纹角度时都用到了应力强度因子这一参量,而计算应力强度因子有几种方法,如 J 积分、等效区域积分和相互作用积分等,一般扩展有限元采用的是相互作用积分。这些方法都会在裂尖处划出一个积分区域,通过对区域内单元节点进行插值计算来得到应力强度因子。其在宏观层面上具有较高适用性。但当应用于微观晶粒层面上时,由于塑性变形较大,如果积分区域想要表征裂尖处的情况则要涵盖数个乃至数十个晶粒,这就在应用和计算上产生了很大的困难。故本文采用累积切应变为断裂准则,当累积切应变 Γ 超过临界值 Γ_{cr} 时,裂纹起裂。裂纹扩展方向取最大主应力方向。

$$\frac{\Gamma}{\Gamma_{cr}} > 1 \quad (9)$$

本文采用 ABAQUS 提供的 XFEM 模块对裂纹进行更新, 断裂准则则通过 UDMGINI 子程序引入。

2.2 基于 Voronoi 图的晶体模型建立方法

三维空间内的 Voronoi 方法的基本原理是将空间划分为 N 个区域, 每一个区域内的所有点距离当前区域种子点比距离其他所有种子点的距离都要近, 这与晶粒生长过程类似。我们可以将三维空间内的 Voronoi 图近似看作金属的晶体结构图, 而每一个种子点所划分的区域便可以视作是一个晶粒所占的空间区域。三维 Voronoi 图如图 2 所示。

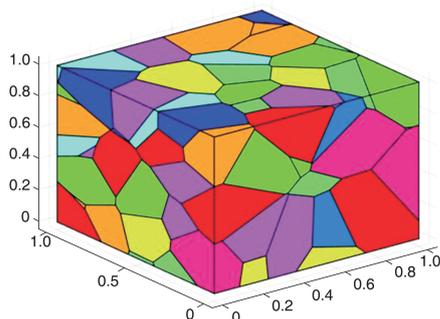


图2 三维Voronoi图
Fig.2 3D-Voronoi diagram

INP 文件是链接 ABAQUS CAE 和 ABAQUS 求解器的桥梁。不论用什么方法建立的模型, 其在进行提交运算时都会转换为 INP 文件传递给 ABAQUS 求解器。本文基于直接修改 INP 文件的方法建立多晶体有限元模型。

首先建立好基础模型, 其包括网格信息、边界条件、裂纹和载荷信息, 如图 3 所示。

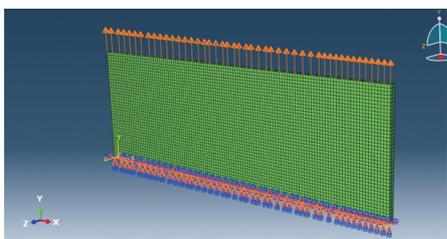


图3 ABAQUS中建立的初始模型
Fig.3 Previous model founded by ABAQUS

建立模型之后将其写入 INP 文件中, 此时获得的 INP 文件仅包括单元和载荷信息, 故需要借助其他工具对其进行编辑, 本文采用 MATLAB 编写脚本程序对 INP 进行二次开发。将数据读入 MATLAB 中, 基于 Voronoi 图原理对网格进行分组, 即将网格分入与其相邻最近的种子点的晶粒之中。

在对所有网格进行分组之后实际上已经完成了对多晶体的建模工作, 之后可以基于 ABAQUS 的关键字系统对模型的材料属性、分析步以及其他模块 (如 XFEM 等) 所需要的参数进行定义。完成材料分组后的模型图如图 4 所示。

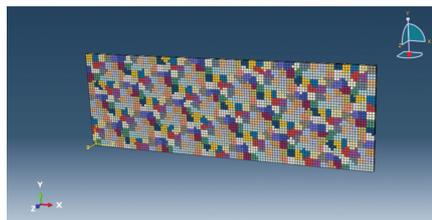


图4 基于 INP 法建立的模型
Fig.4 Model founded by INP method

3 单轴拉伸条件下的应力应变响应

在室温条件下对 LMD-TC18 钛合金试样进行原位拉伸试验, 采用 DIC 方法对其进行观测, 获得其在该条件下的表面应变场。试件金相图和应变场云图如图 5、图 6 所示。

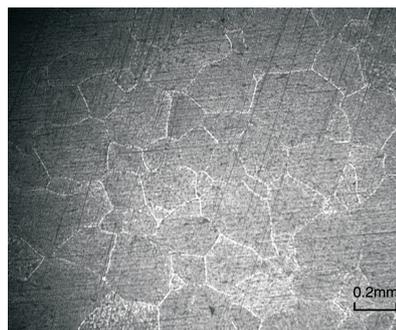


图5 光学显微镜下晶体结构图
Fig.5 Grain structure under optical microscope

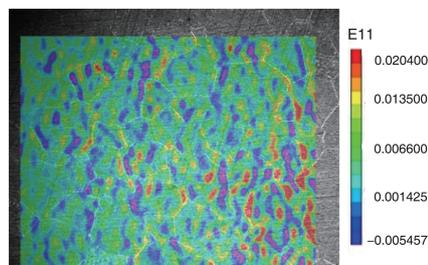


图6 2.5kN 下的 E11 应变场
Fig.6 Full field E11 direction strain cloud map under 2.5kN

基于前文提出的 INP 方法在 ABAQUS 中建立有限元模型, 并通过 UMAT-Fortran 子程序引入晶体塑性理论。模型网格尺寸为 0.1mm, 弹性材料参数取正交各向异性材料参

数^[19],见表1。

表1 正交各向异性材料参数

Table 1 Orthogonal anisotropy material parameter

C11/GPa	C12/GPa	C44/GPa
155.2	89.1	53.3

在确定晶体模型参数时,本文基于应力应变曲线为准则,对LMD-TC18钛合金的单晶体材料参数进行拟合。由于单个柱状晶的晶体取向对结果影响较大且无法避免,而且柱状晶的材料参数与等轴晶类似,故本文采用纯等轴晶模型对材料参数进行拟合。

首先对材料参数进行初始条件限制,该条件基于VOCE硬化模型确定: $\tau_0 = 0.9\tau_s, q_{\alpha\beta} = 1$ 。

基于此初始条件迭代后得到的试验模拟应力应变曲线对比图如图7所示,从图7中可以看出该组材料参数可以很好地反映材料的真实应力应变响应,材料参数见表2。

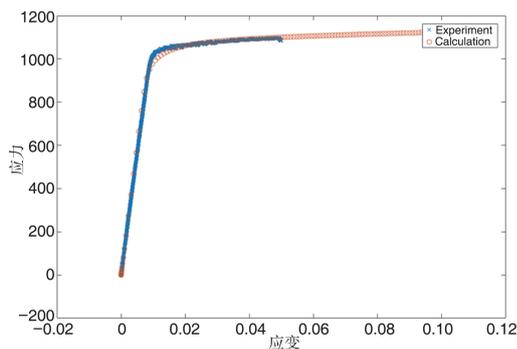


图7 试验与模拟的应力应变对比图

Fig.7 Experimental and simulated stress-strain comparison chart

表2 单晶体材料参数

Table 2 Material parameter of single crystal

m	τ_0/MPa	τ_s/MPa	h_0/MPa	h_s/MPa
30	400	445	150	20

基于该组材料参数得到的有限元应变云图如图8所示。

由图8可以看出,基于晶体塑性理论的有限元模型可以很好地重现多晶体材料中不同晶粒因晶体取向不同而引起的各向异性变形现象。因此在引入扩展有限元并将基于隐式推进的率相关本构激活后便可基于该理论对疲劳裂纹的实时扩展进行模拟。从而实现与试验所得 da/dN 曲线无关的疲劳裂纹扩展模拟。

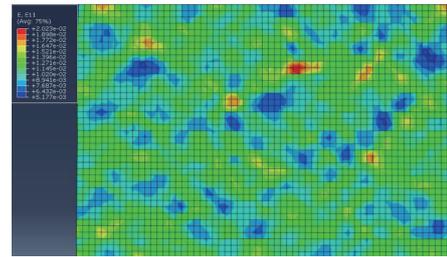


图8 等轴晶模型的E11应变云图

Fig.8 E11 strain cloud map of the equiaxed crystal model

4 疲劳裂纹扩展模拟

由LMD-TC18钛合金制取的疲劳试件在组织结构上具有显著的周期性各向异性特征。由不同取材方向CT试件进行试验所得的结果如图9所示^[11],在加载方向与沉积方向(柱状晶生长方向)呈不同角度时,裂纹扩展路径不同,加载方向垂直(图9(a))或与沉积方向呈45°(图9(b))时,裂纹为典型的I形裂纹,当加载方向平行于沉积方向时,裂纹扩展路径发生显著的宏观偏斜(图9(c))。

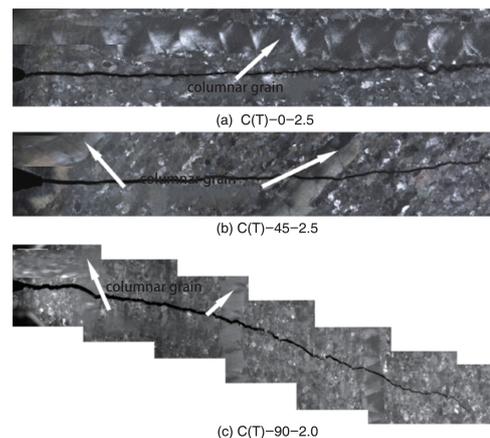


图9 疲劳裂纹路径

Fig.9 Fatigue crack path

为了在有限元中重现这一现象,本文基于CPFEM与XFEM建立了有限元模型,模型单晶材料参数与静力模型相同,但等轴晶区域每一个等轴晶都具有一个随机的晶体取向,每一块柱状晶分别具有一个随机的晶体取向。施加正弦载荷,最大载荷0.01应变,应变比0.1,获得如图10所示的结果。

从图10中可以看出基于晶体塑性有限元和扩展有限元的模型成功地重现了试验中发现的裂纹偏斜现象,当载荷与沉积方向呈45°或90°时,偏斜行为不明显,裂纹仍为I形裂纹,当加载方向平行于沉积方向时,裂纹扩展明显受到

了组织的影响,持续向一侧偏斜。

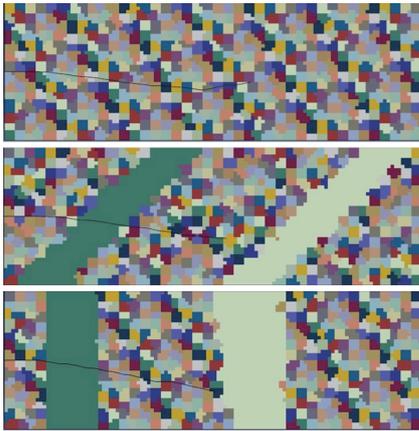


图 10 疲劳裂纹路径模拟
Fig. 10 Fatigue crack path simulation

5 结论

通过分析,可以得出以下结论:

(1) 本研究将扩展有限元与晶体塑性有限元相结合,对晶粒组织合理建模,对LMD-TC18钛合金的静力及疲劳裂纹扩展路径进行了模拟,较好地重现了试验结果。

(2) 本文则以率相关本构为核心,实现了独立于 da/dN 曲线的疲劳裂纹扩展分析,获得的组织对疲劳裂纹扩展路径的影响与试验结果一致,并与PD模拟得到的结果一致。

(3) 实际LMD制造TC18钛合金的晶粒组织中存在大量的初生 α 相体,这对疲劳裂纹扩展路径产生了较大的影响,而这一影响并未在本模拟中得到体现,有待之后的研究进行补充。

AST

参考文献

- [1] 王华明,张述泉,王向明. 大型钛合金结构件激光直接制造的进展与挑战[J]. 中国激光,2009,36(12):3204-3209.
Wang Huaming, Zhang Shuquan, Wang Xiangming. Progress and challenges of laser direct manufacturing of large titanium structural components[J]. Chinese Journal of Lasers, 2009,36(12): 3204-3209. (in Chinese)
- [2] Gibson I, Rosen D W, Stucker B. Additive manufacturing technologies: rapid prototyping to direct digital manufacturing [M]. Springer, 2010.
- [3] 吴复尧,刘黎明,许沂,等. 3D打印技术在国外航空航天领域的发展动态[J]. 飞航导弹,2013(12):10-15.
Wu Fuyao, Liu Liming, Xu Yi, et al. Development of 3D printing technology in foreign aerospace industry[J]. Aerodynamic Missile Journal, 2013(12):10-15. (in Chinese)
- [4] 巩水利,锁红波,李怀学. 金属增材制造技术在航空领域的发展与应用[J]. 航空制造技术, 2013, 433(13):66-71.
Gong Shuili, Suo Hongbo, Li Huaixue. Development and application of metal additive manufacturing technology[J] Aeronautical Manufacturing Technology, 2013, 433(13):66-71. (in Chinese)
- [5] 王洋,张述泉,刘长猛,等. 激光熔化沉积TC18钛合金组织及缺口高周疲劳性能[J]. 金属热处理,2013,38(05):10-13.
Wang Yang, Zhang Shuquan, Liu Changmeng, et al. Microstructure and notched high-cycle fatigue property of laser melting deposited TC18 titanium alloy[J]. Heat Treatment of Metals, 2013, 38(05):10-13. (in Chinese)
- [6] 周庆军,严振宇,韩旭,等. 激光熔化沉积TC11钛合金的组织与力学性能[J]. 中国激光,2018,45(11):61-68.
Zhou Qingjun, Yan Zhenyu, Han Xu, et al. Microstructure and mechanical properties of laser melting deposited TC11 titanium alloys[J]. Chinese Journal of Lasers, 2018, 45(11): 61-68. (in Chinese)
- [7] 高明鉴. TA15/Ti2AlNb梯度材料激光熔化沉积工艺研究及数据库开发[D]. 哈尔滨:哈尔滨工业大学,2017.
Gao Mingjian. Research and database development of laser deposition process for TA15/Ti2AlNb gradient materials[D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2017. (in Chinese)
- [8] 刘鹏飞,陆兴,覃作祥,等. 激光熔化沉积TC11钛合金的疲劳裂纹扩展行为[J]. 大连交通大学学报,2019,40(01):67-71.
Liu Pengfei, Lu Xing, Qin Zuoxiang, et al. Fatigue crack growth behavior of Ti-6.5Al-3.5Mo-1.5Zr-0.3Si alloy prepared by laser melting deposition[J]. Journal of Dalian Jiaotong University, 2019, 40(01):67-71. (in Chinese)
- [9] Wu Yanzeng, Bao Rui. Fatigue crack tip strain evolution and crack growth prediction under single overload in laser melting deposited Ti-6.5Al-3.5Mo-1.5Zr-0.3Si titanium alloy[J]. International Journal of Fatigue, 2018, 116:462-472.
- [10] Wu Yanzeng, Bao Rui, Zhang Shaoqin. In-situ measurement of near-tip fatigue crack displacement variation in laser melting deposited Ti-6.5Al-3.5Mo-1.5Zr-0.3Si titanium alloy[Z]. Structural Integrity Procedia, 2018.
- [11] Wang Kai, Bao Rui, Jiang Bao, et al. Effect of primary α phase on

- the fatigue crack path of laser melting deposited Ti-5Al-5Mo-5V-1Cr-1Fe near β titanium alloy[J]. International Journal of Fatigue, 2018,116:535-542.
- [12] Xu Yaowu, Bao Rui. Residual stress determination in friction stir butt welded joints using a digital image correlation-aided slitting technique[J]. Chinese Journal of Aeronautics, 2017,30(3):1258-1269.
- [13] Xu Yaowu, Liu Hao, Bao Rui, et al. Residual stress evaluation in welded large thin-walled structures based on eigenstrain analysis and small sample residual stress measurement[J]. Thin-Walled Structures, 2018, 131:782-791.
- [14] Xu Yaowu, Bao Rui, Liu Hao, et al. A modified loading method for separating the effect of residual stress on fatigue crack growth rate of welded joints[J]. Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, 2017, 40(8):1227-1239.
- [15] Wu Yanzeng, Xu Yaowu, Guo Xiang, et al. Fatigue life prediction based on equivalent initial flaw size for AL-Li alloy 2297 under spectrum loading[J]. International Journal of Fatigue, 2017, 103: 39-47.
- [16] 杨忠伟, 蒋宝, 石乃文, 等. 复合材料层板螺钉连接结构破坏的近场动力学模拟[C]//北京力学学会第24届学术年会, 2018.
- Yang Zhongwei, Jiang Bao, Shi Naiwen, et al. Peridynamics simulation of failure of composite laminates[C]// The 24th Annual Meeting of the Beijing Society of Mechanics, 2018. (in Chinese)
- [17] Asaro R J, Needleman A. Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals[J]. Acta Metall, 1985, 33 (6): 923-953.
- [18] Tome C, Canova G, Kocks U, et al. The relation between macroscopic and microscopic strain hardening in F. C. C. polycrystals[J]. Acta Metallurgica, 1984,32(10) 1637-1653.
- [19] Safaa L, Stéphane B, Nathalie G. Micromechanical modeling of the effect of elastic and plastic anisotropies on the mechanical behavior of β -Ti alloys[J]. International Journal of Plasticity, 2018,109:88-107. (责任编辑 皮卫东)

作者简介

任斯远(1995—)男,硕士。主要研究方向:晶体塑性有限元。

Tel: 010-82314703

E-mail: erickren@qq.com

鲍蕊(1978—)女,博士,教授。主要研究方向:飞机结构疲劳/耐久性,断裂力学、损伤容限、焊接整体结构完整性、飞机结构综合环境长寿命设计与分析评定技术。

Tel:010-82314957 Email:rbao@buaa.edu.cn

Crystal Plastic Finite Element Analysis of Crack Propagation Behavior of Additive Titanium Alloy

Ren Siyuan, Wang Kai, Liu Binchao, Bao Rui*

School of Aeronautics Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China

Abstract: In this paper, a crystal plastic finite element model based on Voronoi diagram was established with the combination of MATLAB and extended finite element method in Abaqus. To verify this model, the effects of crystal orientations on static properties and fatigue crack growth of laser melting deposited TC18 titanium alloy were simulated. The experimental phenomena can be well reproduced by the model, and the reasons for such phenomena were further discussed. The proposed model is capable of effectively describing the anisotropy responses of metal crystals, which provides a useful guidance for analyzing fatigue crack growth in additively manufactured titanium alloys and improving damage tolerance performance by process optimization.

Key Words: laser melting deposition; crystal plasticity; fatigue; extended finite element method; crack propagation

Received:2019-08-15; **Revised:** 2019-08-23; **Accepted:** 2019-08-30

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(11672012)

***Corresponding author.** Tel. : 010-82314957 **E-mail:** rbao@buaa.edu.cn