

基于晶体塑性有限元法的316LN不锈钢 单轴力学行为

陈小辉, 陈天祥, 朱琳, 郎朗
(东北大学秦皇岛分校 控制工程学院, 河北 秦皇岛 066004)

摘要: 为了更准确描述316LN不锈钢单轴力学行为,在率相关晶体塑性理论框架下,以Ahmadzadeh-Varvani (A-V) 随动硬化准则为基础,构建了多晶循环塑性本构模型. 通过程序UMAT将其移植到有限元软件ABAQUS中,并通过Voronoi图建立二维多晶有限元模型;分别模拟了不同加载率、应变循环和非对称应力循环条件下316LN不锈钢的变形行为. 对比模拟结果与实验数据可知:单轴拉伸条件下,两者的应力误差在 $\pm 0.9\%$ 附近波动,最大应力误差仅为1.9%;应变循环条件下,两者的最大应力误差出现在第5圈,拉伸和压缩阶段应力误差分别为11.4%和12.2%,循环稳定后,拉伸和压缩阶段应力误差分别为7.4%和7.9%;应力循环条件下,两者的误差主要体现在滞环宽度上,模拟的滞环面积相对较窄,但滞环演化趋势误差较小.

关键词: 晶体塑性理论; A-V 随动硬化准则; 饱和硬化准则; Voronoi 图; 棘轮效应

中图分类号: TB 302.3; TH 123.4 文献标志码: A 文章编号: 1005-3026(2024)06-0843-07

Uniaxial Mechanical Behavior of 316LN Stainless Steel Based on Crystal Plasticity Finite Element Method

CHEN Xiao-hui, CHEN Tian-xiang, ZHU Lin, LANG Lang

(School of Control Engineering, Northeastern University at Qinhuangdao, Qinhuangdao 066004, China.
Corresponding author: CHEN Xiao-hui, E-mail: chenxh@neuq.edu.cn)

Abstract: To describe the uniaxial mechanical behavior of 316LN stainless steel more accurately, a polycrystalline cyclic plasticity constitutive model is constructed based on the Ahmadzadeh-Varvani (A-V) kinematic hardening rule in the framework of the rate-dependent crystal plasticity theory. The constitutive model is implemented to the finite element software ABAQUS through the UMAT, and a two-dimensional polycrystalline finite element model is established through Voronoi diagrams. And then the deformation behavior of 316LN stainless steel is simulated under different loading rates, strain cycles and asymmetric stress cycles, respectively. The simulated results compared with the experimental data show that under the uniaxial tensile condition, the stress errors of both fluctuate around $\pm 0.9\%$, and the maximum stress error is only 1.9%; under the strain cycle condition, the maximum stress error between the two appears in the 5th cycle, with 11.4% and 12.2% errors in the tensile and compression phases, respectively, and 7.4% and 7.9% errors in the tensile and compression phases, respectively, after cycle stabilization. Under the asymmetric stress cycle condition, the errors of both mainly appear in the hysteresis loop width, the simulated hysteresis loop width is narrower, but the error of the hysteresis loop evolution trend is smaller.

Key words: crystal plasticity theory; A-V kinematic hardening rule; saturation hardening rule; Voronoi diagram; ratcheting effect

316LN 不锈钢具有优异的力学性能和抗腐蚀性能,被广泛应用于核电主管道和反应堆内部等关键部位^[1-2].在核电站工作过程中,这些关键部位可能会受到内压、振动、温度的波动等因素影响而发生疲劳失效.疲劳设计是核电站安全评估的重要内容.目前 ASME 规范^[3]设计的核级结构材料的疲劳曲线是基于室温下获得的低周疲劳(LCF)数据确定的,常用的方法是使用本构模型对材料单轴载荷下的力学行为进行预测.现有本构模型可以分为宏观唯像模型和晶体塑性模型两大类.宏观唯像模型多是针对某一或多个宏观实验现象进行唯像的改进,无法反映材料变形过程中的微观物理本质.从微观尺度看,金属材料的塑性变形包含滑移、孪生、马氏体相变等.为了反映材料微观变形的物理本质,在晶体塑性理论的基础上,逐步发展了耦合多种变形机制的晶体塑性模型.

近年来,众多学者对 316LN 不锈钢微观塑性变形过程和晶体塑性本构模型进行了大量研究. Li 等^[4]通过对显微组织表征分析,研究了 316LN 不锈钢循环变形过程中背应力和摩擦应力的状态. Hong 等^[5]通过实验和分子动力学模拟,研究了原子尺度上 316LN 不锈钢棘轮变形初始阶段的微观组织演化机制.

在晶体塑性本构模型方面, Kang 等^[6]采用显式的尺度过度准则将单晶塑性本构模型跨越到多晶层面.郭宁^[7]基于实验表征,将孪生作为类滑移处理,构建了耦合滑移、孪生和马氏体相变三机制的晶体塑性本构模型. Samal^[8]使用晶体塑性本构模型研究了合金中析出物体积分数、形状和大小对位错运动的影响. Feather 等^[9]研究了晶体塑性本构模型硬化部分网格的敏感性,通过大量后处理工作,讨论了单元类型和网格密度对求解精度的影响.韩小寒^[10]使用晶体塑性本构模型研究了 316LN 不锈钢发生大变形后粗大晶粒再结晶内部形核的可能性.目前,基于晶体塑性本构模型对 316LN 不锈钢的研究侧重于晶粒内部变形行为,结合微区变形和宏观力学行为的研究还较少.

本文在率相关晶体塑性理论框架下,以 Ahmadzadeh-Varvani (A-V) 随动硬化准则^[11]为基础,构建了多晶循环塑性本构模型,并通过 Voronoi 图构建二维多晶有限元模型.然后,利用其研究了 316LN 不锈钢在单轴单调和循环载荷作用下的变形行为.

1 多晶循环塑性本构模型和有限元实现

316LN 不锈钢由面心立方(FCC)晶体组成^[12],其主要变形方式为位错滑移,晶体中包含 4 个原子密排面,每个面上包含 3 个原子密排方向,共有 12 个等价滑移系;在应变循环和非对称应力循环条件下,316LN 不锈钢会分别表现出循环硬化特性和棘轮效应.为了能从晶粒层面同时描述材料的循环硬化特性和棘轮行为,基于晶体塑性理论构建了多晶循环塑性本构模型并将其移植到有限元软件中.

1.1 晶体塑性模型

在小变形理论下,将总应变分为弹性应变和黏塑性应变两部分:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}^e + \boldsymbol{\varepsilon}^{vp}. \quad (1)$$

式中: $\boldsymbol{\varepsilon}$ 是总应变张量; $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ 是弹性应变张量; $\boldsymbol{\varepsilon}^{vp}$ 是黏塑性应变张量.

弹性应变遵循广义胡克定律:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^e = \mathbf{C}^{-1} \boldsymbol{\sigma}. \quad (2)$$

式中: \mathbf{C} 为四阶弹性张量; $\boldsymbol{\sigma}$ 为应力张量.

根据 Schmid 定律,当滑移系的分切应力大于其临界应力时滑移系开动,分切应力表达式为

$$\tau^\alpha = \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{P}^\alpha, \quad (3)$$

$$\mathbf{P}^\alpha = \frac{1}{2} (\mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha + \mathbf{n}^\alpha \otimes \mathbf{m}^\alpha). \quad (4)$$

式中: τ^α 是第 α 个滑移系的分切应力; \mathbf{P}^α 是第 α 个滑移系的 Schmid 因子; \mathbf{m}^α 和 \mathbf{n}^α 分别是第 α 个滑移系滑移方向和滑移面法向的单位向量.

黏塑性应变是所有开动的滑移系应变总和:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \sum_{\alpha=1}^n \mathbf{P}^\alpha \dot{\gamma}^\alpha. \quad (5)$$

式中: $\dot{\gamma}^\alpha$ 是第 α 个滑移系的剪切应变率,表达式为

$$\dot{\gamma}^\alpha = \left\langle \frac{|\tau^\alpha - X^\alpha| - g^\alpha}{K} \right\rangle^n \text{sgn}(\tau^\alpha - X^\alpha). \quad (6)$$

式中: X^α 是第 α 个滑移系的等效背应力; g^α 是第 α 个滑移系的各向同性应变抗力; K 和 n 是率相关参数; $\langle \cdot \rangle$ 是 McCauley 括号,表示当括号中的值大于 0 时结果等于该值,反之结果为 0; $\text{sgn}(\cdot)$ 是符号运算,表示当括号中的值大于 0 时结果为 1,反之结果为 -1.

1.2 随动硬化准则和饱和硬化准则

为了使本构模型能够描述材料在晶粒层面的棘轮行为,在每个滑移系引入了 A-V 非线性随动硬化准则,其表达式为

$$\dot{X}^\alpha = C\dot{\gamma}^\alpha - v_1(X^\alpha - \delta b)|\dot{\gamma}^\alpha|, \quad (7)$$

$$\dot{b} = v_2(X^\alpha - b)|\dot{\gamma}^\alpha|. \quad (8)$$

式中:材料常数 C 和第一反馈速率 v_1 共同控制滞环大小;第二反馈速率 v_2 控制 $(X^\alpha - b)$ 的平均速率值;权重系数 δ 影响棘轮的演化速度.

文献[12]表明,316LN不锈钢具有循环硬化特性,其是由晶粒内部位错累积对位错滑移继续运动产生阻碍作用导致的.为了描述晶粒内部的位错累积,本文采用Kalidindi^[13]提出的针对FCC晶体滑移建立的饱和硬化模型,该模型对位错滑移引起的材料硬化具有较强的描述能力,其表达式为

$$\dot{g}^\alpha = h_s^\alpha \left(1 - \frac{g^\alpha}{g_s^\alpha}\right) \sum_{\beta=1}^n |\dot{\gamma}^\beta|. \quad (9)$$

式中: g^α 为第 α 个滑移系的滑移阻力; \dot{g}^α 为第 α 个滑移系的滑移阻力率; h_s^α 为第 α 个滑移系的硬化率; g_s^α 为第 α 个滑移系的滑移阻力饱和值.

1.3 有限元实现

为了对316LN不锈钢材料的力学行为进行模拟和预测,需要搭建模型的数值积分算法.本文采用半隐式积分算法,对上一小节中的循环塑性本构模型进行积分求解.首先定义 α 滑移系在 t 时刻到 $t + \Delta t$ 时刻的时间间隔 Δt 内的滑移增量为

$$\Delta\gamma^\alpha = \Delta t[(1 - \theta)\dot{\gamma}_t^\alpha + \theta\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^\alpha]. \quad (10)$$

其中 θ 取值为0.5^[14].

将非线性方程退化为线性方程,即利用Taylor公式对其进行一阶展开并忽略高阶误差,可以得到

$$\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^\alpha = \dot{\gamma}_t^\alpha + \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \Big|_t \Delta\tau^\alpha + \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial X^\alpha} \Big|_t \Delta X^\alpha + \frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial g^\alpha} \Big|_t \Delta g^\alpha. \quad (11)$$

假定 t 时刻相关参量均已求解,则通过式(11)可以求解出剪切应变率在 $t + \Delta t$ 时刻的近似解.再求解隐式非线性方程组的解,定义求解的非线性方程为

$$F(\Delta\gamma^\alpha) = \Delta\gamma^\alpha - \Delta t(1 - \theta)\dot{\gamma}_t^\alpha - \Delta t\theta\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^\alpha = 0. \quad (12)$$

采用Newton-Raphson迭代求解其精确值,这样能保证计算的精度和效率.该方程组的解即为 α 滑移系在时间间隔 Δt 内的剪切应变增量.

为了保证迭代过程的无条件稳定性和收敛速度,使用隐式积分方法求解每一增量步的整体平衡方程时,需要提供一致切线刚度矩阵,该矩阵表达式为

$$\mathbf{C}^{\text{alg}} = \frac{d\Delta\boldsymbol{\sigma}}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbf{C} - \sum_{\alpha=1}^n \left[(\mathbf{C} : \mathbf{P}^\alpha) \otimes \frac{d\Delta\dot{\gamma}^\alpha}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}} \right]. \quad (13)$$

式中: $\frac{d\Delta\dot{\gamma}^\alpha}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}}$ 是一个2阶张量,可以通过求解以下方程得到.

$$\frac{d\Delta\dot{\gamma}^\alpha}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}} = \theta\Delta t \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial \tau^\alpha} \right) \frac{d\Delta\tau^\alpha}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial X^\alpha} \right) \frac{d\Delta X^\alpha}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^\alpha}{\partial g^\alpha} \right) \frac{d\Delta g^\alpha}{d\Delta\boldsymbol{\varepsilon}} \right]. \quad (14)$$

对上述本构模型的积分求解结束后,利用Fortran语言开发用户材料子程序UMAT.

2 有限元模型

在UMAT子程序编写完成后,即可通过ABAQUS软件提供的标准接口实现本构模型的有限元移植,然后使用模型来模拟316LN不锈钢多晶材料的单轴拉伸和循环变形行为.本节先介绍通过Voronoi图构建的有限元模型.

2.1 二维Voronoi模型

从微观尺度看,316LN不锈钢由多个大小、形状和取向均随机的晶粒组成,晶粒形状和晶体取向的随机性均会对计算结果产生影响.为了使有限元模型能够更真实地反映316LN不锈钢的晶粒形态和微观变形过程,本文基于Voronoi图及其相关理论^[15],结合Python语言与Abaqus前处理接口构建了二维多晶有限元模型.为了避免晶粒形状的随机性导致的网格畸变对计算结果产生影响,本文将弯曲晶界改为阶梯晶界^[14],同时,文献[16]证明当晶粒数量达到100时可以忽略晶体取向对计算结果的影响.本文建立的二维Voronoi模型如图1所示,模型共包含97个晶粒,总单元数为6400,平均晶粒尺寸为40 μm .

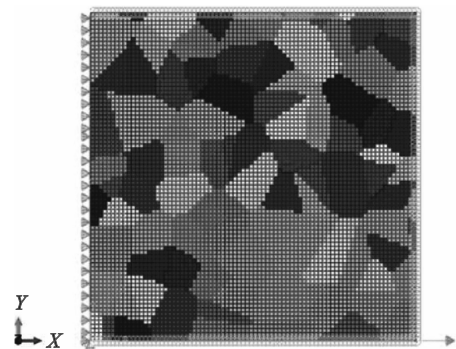


图1 二维多晶有限元模型和边界条件

Fig. 1 Two-dimensional polycrystalline finite element model and boundary conditions

2.2 单元选择和边界条件

考虑到实验条件下316LN不锈钢在单轴单

调和循环变形时 Z 向表面自由的情况,本文采用 CPS4 平面应力单元对模型进行网格划分,同时在不考虑晶粒取向占优的条件下对模型设置边界条件.如图 1 所示,左边界约束位移 $X=0$,左下角点约束位移 $X=Y=0$;右下角点与右边界其余点在 X 方向建立耦合,使右侧边具有相同位移;上边界和下边界分别在 Y 方向建立耦合;在右下角点 X 方向施加力载荷或位移载荷.

采用上述边界条件可使模型作为多晶材料的可重复代表性单元,在小变形情况下,这与实验加载条件是相符合的.

2.3 材料参数的确定

施加完约束后,需要对每个晶粒赋予模型相关参数.如表 1 所示,其中弹性常数取自文献[12],其余参数采用逐渐逼近方法确定,赋予参数后的有限元模型整体上趋于各向同性,可以描述 316LN 不锈钢的宏观力学性能.在完成有限元计算后,采用文献[17]中给出的简化提取法获取宏观应力-应变结果.

表 1 晶体本构模型参数
Table 1 Crystal constitutive model parameters

参数	值
E/GPa	195
ν	0.37
n	6.8
k/MPa	48
C	4 200
ν_1	130
ν_2	10
δ	0.6
g_0/MPa	64
h_s/MPa	25
g_s/MPa	420

3 分析讨论

本节将利用编写的 UMAT 子程序,结合图 1 所示的有限元模型,模拟 316LN 不锈钢材料的单轴拉伸和循环变形行为,并与相应的实验结果作对比,以验证本构模型的适用性.

3.1 单轴拉伸模拟

图 2 为 316LN 不锈钢在不同加载率下单轴拉伸的模拟结果和实验数据对比.从图中可以看到,本文所用的多晶循环塑性本构模型对 316LN 不锈钢在不同加载率下单轴拉伸的模拟结果与实验数据吻合良好.以实验应力为标准 x ,取相同

应变下模拟应力为 y ,规定相对误差 $z=(x-y)/x \times 100\%$,计算得到模拟和实验的应力误差在 $\pm 0.9\%$ 附近波动,最大应力误差仅为 1.9%.

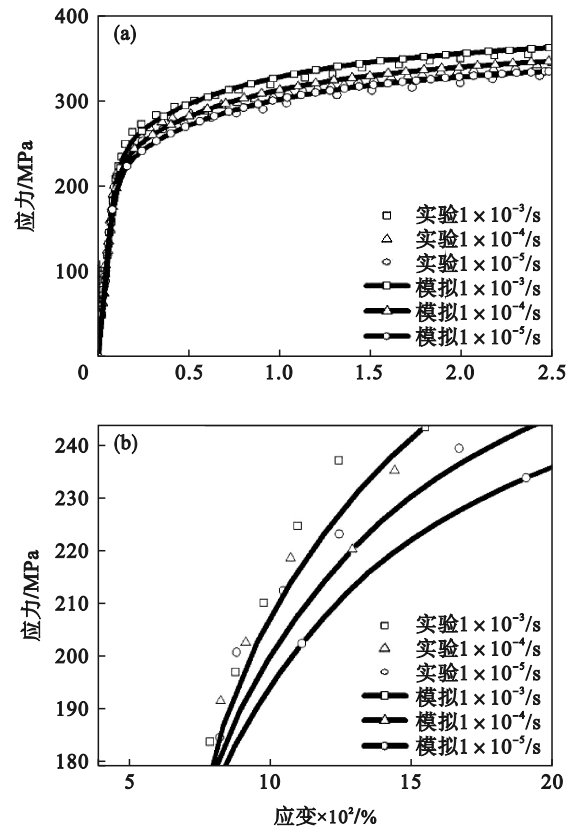


图 2 不同加载率下的单轴拉伸模拟

Fig. 2 Uniaxial tensile simulation at different loading rate

(a)—应力-应变曲线; (b)—局部放大曲线.

图 3a 和图 3b,图 3c 和图 3d,图 3e 和图 3f 分别是加载率 1×10^{-5} , 1×10^{-4} 和 $1 \times 10^{-3}/\text{s}$ 时 316LN 不锈钢单轴拉伸模拟得到的应力和应变云图,其中 S_{11} 和 LE_{11} 分别为 X 方向的应力和应变.从图中可以看出,多晶体内部的应力和应变呈现出均匀性,最大应力和最大应变远高于平均水平;在拉伸状态下,由于晶粒的晶体取向和几何形状不同,晶粒内部还会出现局部压应力;随着加载率的上升,位错滑移速度加快,更容易形成位错塞积,位错运动受阻会导致应力升高,此时晶粒内部应变在有利于滑移的位置增大,材料的应力-应变水平随加载率的上升而提高,表现出了 316LN 不锈钢的率相关性.

3.2 应变循环模拟

图 4 为应变幅值为 $\pm 1\%$ 、加载率为 $1 \times 10^{-3}/\text{s}$ 时应变循环的模拟结果与实验数据对比.从图 4a 中可以看出,应变循环第一圈的模拟结果与实验数据接近,模拟的滞回曲线形状与实验数据吻合

较好;从图 4b 中可以看出,硬化速度的模拟结果与实验数据接近,最大应力误差出现在循环第 5 圈,拉伸应力的模拟结果比实验数据低 11.4%,压缩应力的模拟结果比实验数据低 12.2%;材料在循环 15 圈以后接近稳定状态,循环稳定后模拟结果与实验数据的误差较小,拉伸应力的模拟结果比实验数据低 7.4%,压缩应力的模拟结果比实验数据低 7.9%.从实验数据可以发现,316LN 不锈

钢应变循环初期的硬化速度很快,模拟的硬化速度低于实验硬化速度.影响模型硬化速度的参数为 h_s ,在参数确定过程中,首先根据实验单轴棘轮滞回曲线确定了随动硬化参数,为了保证单轴拉伸模拟结果的准确性,参数 h_s 的取值不宜过高,这导致模拟的硬化速度低于实验硬化速度.但从整体上看,模拟结果与实验数据接近,证明模型较为准确地预测了 316LN 不锈钢的循环硬化特性.

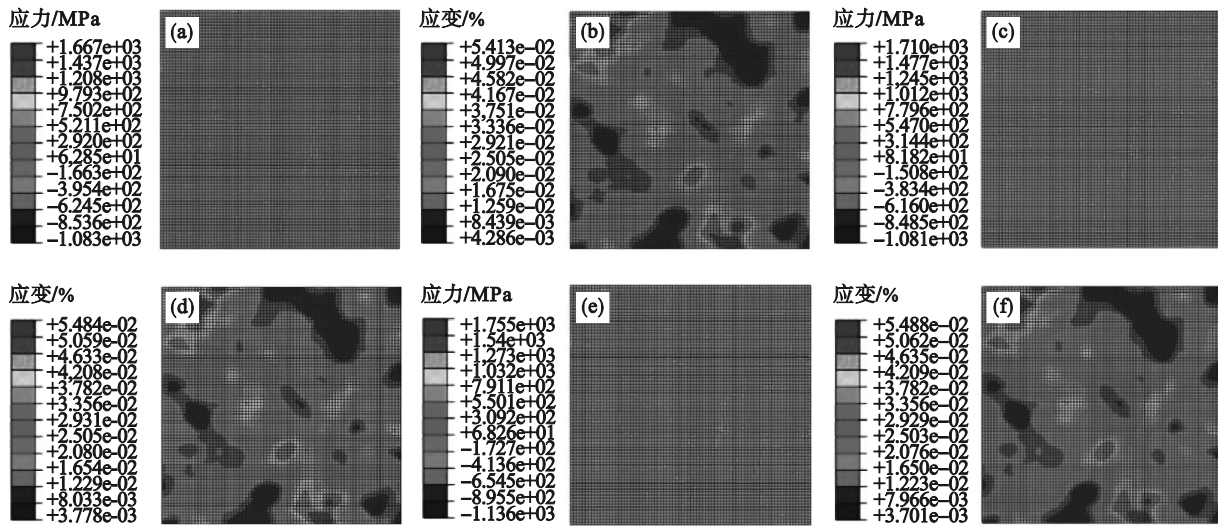


图 3 单轴拉伸后的应力和应变云图

Fig. 3 Stress and strain nephograms after uniaxial tensile

- (a)—加载率 $1 \times 10^{-5}/s$ 时 X 方向应力 S11; (b)—加载率 $1 \times 10^{-5}/s$ 时 X 方向应变 LE11;
- (c)—加载率 $1 \times 10^{-4}/s$ 时 X 方向应力 S11; (d)—加载率 $1 \times 10^{-4}/s$ 时 X 方向应变 LE11;
- (e)—加载率 $1 \times 10^{-3}/s$ 时 X 方向应力 S11; (f)—加载率 $1 \times 10^{-3}/s$ 时 X 方向应变 LE11.

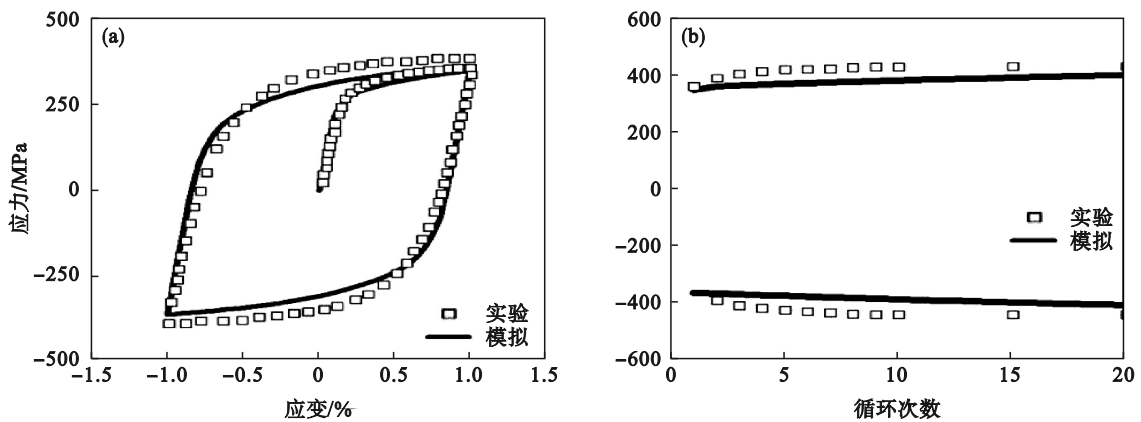


图 4 应变幅值 $\pm 1\%$ 时对称应变循环的结果

Fig. 4 Results of symmetrical strain cycle under strain amplitude $\pm 1\%$

- (a)—第 1 圈应力-应变关系; (b)—前 20 圈的应力峰值与循环次数之间的关系.

3.3 应力循环模拟

图 5 和图 6 为应力范围为 (125 ± 200) MPa、加载应力率 100 MPa/s 时的模拟结果与实验数据^[15]对比.从图中可以发现,模拟的滞回曲线形状与实验数据接近,但实验的滞环在循环初期为明显不封闭状态.滞环的不封闭性与棘轮应变的

累积相对应:循环初期滞环不封闭性明显,棘轮应变率大,棘轮应变累积速度快;随着循环次数增加,滞环不封闭性变得不明显,棘轮应变率下降,棘轮应变累积速度也随之降低.本研究模拟的滞回曲线和棘轮应变演化速度与实验数据均吻合较好,证明模型较为准确地预测了 316LN 不

锈钢的棘轮效应.模拟结果与实验数据还存在一定误差,这是因为A-V模型是在A-F^[18]模型的基础上改进得到的,其只含有一个背应力项,并且A-V随动硬化参数是根据循环稳定时的棘轮滞

回曲线确定的,因此在循环初期A-V模型的预测效果不好,但对循环稳定后的棘轮应变模拟较好.

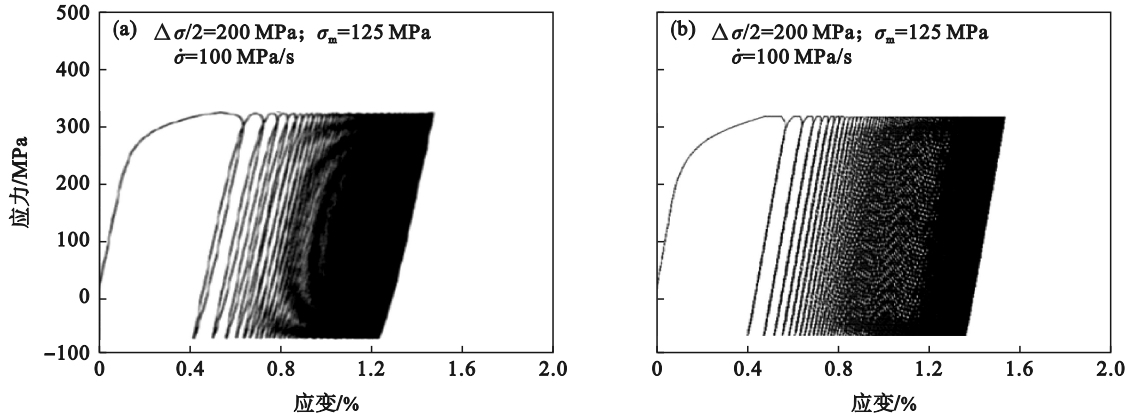


图5 应力-应变滞回曲线

Fig. 5 Stress-strain hysteresis curve

(a)—实验^[12]; (b)—模拟.

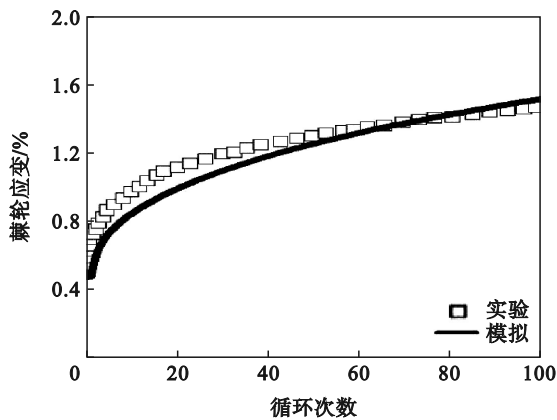


图6 棘轮应变演化速度

Fig. 6 Ratcheting strain evolution rate

4 结 论

1) 316LN 不锈钢的应力-应变水平随单轴加载率上升而上升;模拟的应力-应变曲线与实验数据吻合较好,最大应力误差仅为 1.9%.

2) 应变循环模拟的滞回曲线与实验数据吻合较好;模拟的应力峰值与实验数据接近,最大误差出现在循环第 5 圈,拉伸和压缩阶段应力误差分别为 11.4% 和 12.2%,循环稳定后两者的误差较小,拉伸和压缩阶段应力误差分别为 7.4% 和 7.9%,证明模型成功预测了材料的循环硬化特性.

3) 非对称应力循环模拟出的滞回曲线形状与实验数据接近;滞环的不封闭性与棘轮应变速度相对应,随着循环圈数的增加,滞环的不封闭

性逐渐变得不明显,棘轮应变速度也由快变慢,模拟的棘轮应变的演化速度与实验数据吻合较好,证明模型成功预测了材料的棘轮效应.

参考文献:

- [1] Lin Q, Chen X, Zheng Y M, et al. Multiaxial isothermal and thermomechanical fatigue behavior of 316LN stainless steel [J]. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 2022, 197: 104-633.
- [2] Tan J B, Wu X Q, Han E H, et al. Strain-rate dependent fatigue behavior of 316LN stainless steel in high-temperature water [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2017, 489: 33-41.
- [3] American Society Mechanical Engineers. ASME boiler and pressure vessel code section III [S]. New York: [s.n], 2004.
- [4] Li B B, Zheng Y M, Zhao J W, et al. Cyclic deformation behavior and dynamic strain aging of 316LN stainless steel under low cycle fatigue loadings at 550 °C [J]. *Materials Science & Engineering: A*, 2021, 818: 141411.
- [5] Hong C, Chen T, Li Z H, et al. Uniaxial ratcheting behavior and molecular dynamics simulation evaluation of 316LN stainless steel [J]. *Materials Science & Engineering: A*, 2022, 849: 143535.
- [6] Kang G Z, Bruhns O T, Sai K. Cyclic polycrystalline visco-plastic model for ratchetting of 316L stainless steel [J]. *Computational Materials Science*, 2011, 50(4): 1399-1405.
- [7] 郭宁. 高锰钢塑性变形机制的晶体塑性建模研究及应用 [D]. 北京: 北京科技大学, 2018.
(Guo Ning. Crystal plasticity modeling of plastic deformation mechanism for high manganese steel and its application [D]. Beijing: University of Science and Technology Beijing, 2018.)
- [8] Samal M K. Simulation of material stress-strain curve and creep deformation response of nickel based superalloys using crystal plasticity based finite element models [J]. *Transactions of the Indian Institute of Metals*, 2016, 69(4): 949-960.
- [9] Feather W G, Lim H, Knezevic M. A numerical study into

