

DOI:10.16356/j.1005-2615.2023.01.002

晶体塑性模型及其在金属疲劳寿命预测中的应用

易 敏, 胡文轩

(南京航空航天大学航空航天结构力学及控制全国重点实验室, 南京 210016)

摘要: 作为细观尺度上描述各向异性非均质材料塑性变形行为的重要方法, 晶体塑性模型能够基于晶体材料的微观组织结构预测其宏观力学性能, 在航空航天金属的力学性能设计及评估中展现出应用前景。本文总结了晶体塑性模型的发展历程和不同变种, 从流动准则、硬化模型和内部状态变量演化 3 个角度对比分析了唯象晶体塑性模型与基于物理机制的晶体塑性模型的特点与差异; 然后介绍了基于疲劳指示参数和寿命评估准则的晶体塑性有限元在金属疲劳寿命预测领域的应用尝试, 以航空航天常用金属疲劳裂纹萌生寿命预测为例, 给出了部分应用实例表明不同模型的预测能力和适用性; 最后展望了晶体塑性模型和应用的未来发展趋势和有待加强的研究方向。

关键词: 晶体塑性模型; 疲劳寿命; 航空航天; 本构模型; 裂纹萌生

中图分类号: V21 **文献标志码:** A **文章编号:** 1005-2615(2023)01-0012-16

Crystal Plasticity Model and Its Application for Fatigue Life Prediction of Metals

YI Min, HU Wenxuan

(State Key Laboratory of Mechanics and Control of Aerospace Structures, Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, Nanjing 210016, China)

Abstract: As an important methodology to describe plastic deformation behavior of anisotropic heterogeneous materials at the mesoscale, the crystal plasticity (CP) model can predict the macroscopic mechanical properties of crystal materials based on their microstructures, and play a part in the development of new alloys for aerospace applications. The development history of various CP models is summarized. In particular, the similarities and differences between the phenomenological CP model and the physically based CP model are compared and analyzed in terms of flow rules, hardening model, and internal state variable evolution. Then, the practical application of CP finite element method (CPFEM) for the prediction of metal fatigue life is introduced. This method relies on the fatigue indicator parameters and life evaluation criteria. Typical efforts for predicting the fatigue crack initiation life of aerospace metals by CPFEM are overviewed to demonstrate the predictive ability and appropriateness of various models. Finally, an outlook on the future development tendency of CP model and its applications, as well as the related research directions which need to be strengthened, is provided.

Key words: crystal plasticity model; fatigue life; aerospace; constitutive model; crack initiation

收稿日期: 2023-01-08; **修订日期:** 2023-02-15

作者简介: 易敏, 男, 教授, 博士生导师, 国家海外高层次青年人才, 江苏省“双创人才”, 爱思唯尔中国高被引学者(力学/航空宇航)。主要从事先进材料与结构力学研究, 主持了国家级人才青年项目、国家自然科学基金青年/面上项目、两机专项项目课题、JKW173 重点项目专题、德国科学基金(DFG)等项目, 发表 SCI 论文 70 篇(SCI 他引 2 400 余次)。担任中国颗粒学会理事、《航空学报》等期刊青年编委, 获胡海岩科技创新奖、中国航空学会科学技术三等奖等奖励。

通信作者: 易敏, E-mail: yimin@nuaa.edu.cn。

引用格式: 易敏, 胡文轩. 晶体塑性模型及其在金属疲劳寿命预测中的应用[J]. 南京航空航天大学学报, 2023, 55(1): 12-27. YI Min, HU Wenxuan. Crystal plasticity model and its application for fatigue life prediction of metals[J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2023, 55(1): 12-27.

高性能航空航天装备的发展,对金属材料性能提出了更高要求。研制新型轻质高强的金属材料是满足该要求的重要途径,也是目前国内外航空航天金属领域的研究热点与难点。然而,钛合金、镍基高温合金及铝合金等典型航空航天金属的室温成形能力不足、高温微观组织难控制,导致在加工复杂曲面构件时出现生产效率低、产品一致性差等缺陷和问题^[1]。随着新型金属材料的制造与加工工艺的进步,通过调控复杂微观结构来实现宏观力学性能的提升成为可能,但也为理解和预测新型金属材料的力学性能及微观机制带来了新挑战。比如,以钛合金为代表的难变形航空航天金属材料,其包含各向异性显著的密排六方结构(Hexagonal close packed, HCP),一般由性能迥异的两相或多相组成,受载时会表现出明显的不均匀变形。这种不均匀变形由位错滑移、孪晶、晶界变形、晶粒旋转等细观变形机制决定^[2],对材料的宏观力学性能具有关键作用。因此,从复杂微观结构层次深入研究金属材料的变形机制及其与宏观力学性能的关联规律,具有重要的研究意义和应用价值。

目前,已经有不同尺度的研究方法对金属的变形机制和力学性能开展了研究,如密度泛函理论(Density functional theory, DFT)^[3-5]、分子动力学(Molecular dynamic, MD)^[6-9]、离散位错动力学(Discrete dislocation dynamics, DDD)^[10-13]和基于J2流动理论的宏观塑性模型^[14]。然而,除宏观塑性模型以外,其他方法均存在长度尺度或时间尺度的局限性,难以对真实尺寸的样品进行数值模拟。宏观塑性理论为宏观层面的均质化力学行为的模拟提供了可靠方法,并且其参数可以通过多晶试样的力学试验来校准。然而,这种方法也存在一定的局限性:(1)每组参数只对给定的试验条件(温度、应变率、加载方式)和微观结构特征(晶粒尺寸和形态、织构)有效,这些因素的任何变化都需要对模型参数进行重新校准;(2)采用均匀性假设,难以考虑微观结构细节信息,如晶粒大小和取向;(3)预测对微观结构特征敏感材料的力学性能时(比如疲劳、裂纹的萌生与扩展、缺陷的影响等),存在较大困难。晶体塑性理论则从晶体缺陷出发,借助连续介质力学对变形体的运动学描述,建立起晶体缺陷导致的微观剪切与宏观变形及旋转之间的联系。这意味着,晶体塑性模型是一种介于宏观与微观尺度之间的研究方法,可以形成一座连接宏微观尺度的“桥梁”。

早期晶体塑性理论研究主要集中在单晶体的变形机制,而未考虑多晶体中晶粒间的力学相互作用和复杂外部边界条件,一般采用应力平均化的假

设来近似多晶相互作用^[15-16]。后来的学者将晶体塑性理论与有限元方法结合,处理复杂外部边界条件下晶体的塑性变形,描述晶体内的微观滑移剪切机制^[17],这种方法也被称为晶体塑性有限元法(Crystal plasticity finite element method, CPFEM)。得益于两种框架的优势,CPFEM的本构方程在几十年内快速地从经验性黏塑性方程^[18]发展到基于微观结构、包含尺度效应^[19]、界面机制^[20]、多物理场耦合^[21]的多尺度物理模型。由于上述特点,CPFEM在航空航天金属疲劳断裂机理的研究中展现出优势。

本文从晶体塑性本构模型切入,详细介绍了近20年来唯象晶体塑性模型与基于物理机制的晶体塑性模型中流动准则、硬化模型和状态变量演化方程的发展历程和特点;总结了采用CPFEM预测金属疲劳裂纹萌生寿命的理论模型和应用尝试,并展望了未来晶体塑性模型及其应用研究中可能的发展趋势和关注重点。

1 晶体塑性模型

1.1 连续介质力学

在连续介质力学中,变形梯度 F 能够联系当前构型 x 和参考构型 X , 即

$$dx = FdX \quad (1)$$

因此,大多数晶体塑性模型的出发点是将连续介质力学中的变形梯度乘法分解为弹性 F_e 与塑性 F_p 两部分,即

$$F = F_e F_p \quad (2)$$

式中由 F_p 定义的构型被称为中间构型(图 1^[22])。在晶体塑性理论框架内,晶格旋转由 F_e 决定, F_p 不引起晶格旋转与变形^[23]。

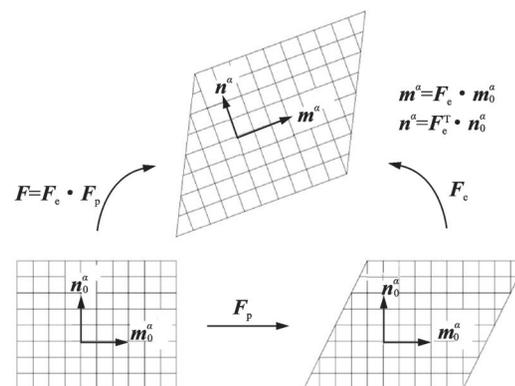


图 1 变形梯度的乘法分解^[22]

Fig.1 Decomposition of the total deformation gradient^[22]

为了描述变形体的动力学行为,连续介质力学引入速度梯度张量

$$L = \dot{F}F^{-1} = \dot{F}_e F_e^{-1} + F_e \dot{F}_p F_p^{-1} F_e^{-1} \quad (3)$$

式中塑性部分可以表示为 $L_p = \dot{F}_p F_p^{-1}$ 。如果晶体的塑性变形只是基于位错滑移机制,则塑性速度梯度^[23]可以表示为

$$L_p = \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{\alpha} m^{\alpha} \otimes n^{\alpha} \quad (4)$$

式中: m^{α} 和 n^{α} 分别为第 α 个滑移系上的滑移方向和滑移面矢量; $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 为对应滑移系上的滑移率; n 为激活的滑移系数。对于同时存在位错滑移和孪晶的金属材料,塑性速度梯度可以分解为

$$L_p = (1 - f_{tw}) \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{\alpha} m^{\alpha} \otimes n^{\alpha} + f_{tw} \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}_{tw}^{\alpha} m_{tw}^{\alpha} \otimes n_{tw}^{\alpha} + f_{tw} \sum_{\alpha=1}^n \dot{\gamma}^{\alpha} Q m^{\alpha} \otimes n^{\alpha} Q^T \quad (5)$$

式中: f_{tw} 为孪晶体积分数; $\dot{\gamma}_{tw}^{\alpha}$ 为孪晶滑移率; m_{tw}^{α} 和 n_{tw}^{α} 分别为孪晶系的孪晶生长方向和孪晶面法向; Q 为旋转张量。

至此,材料的宏观变形已经与晶体内部的微观剪切联系起来。1.2节将详细介绍本构方程如何将外部应力状态与滑移率建立联系。

1.2 本构模型

现有的晶体塑性本构模型可以分为两类:唯象与物理。通常,将内部状态变量作为判断本构模型类别的基准。若状态变量是应力,则为唯象本构模型;若状态变量是位错密度,则为物理本构模型,或称为基于物理机制的本构模型。但在某些模型中,位错密度的演化没有被明确处理,而是采用泰勒关系($\tau \propto \sqrt{\rho}$)进行近似计算,这种模型通常也被视为唯象本构模型^[24]。

1.2.1 唯象本构模型

唯象本构模型将临界分切应力(τ_c^{α})作为每个滑移系上的状态变量,滑移率可以表示为施加在滑移系上的分切应力(τ^{α})与临界分切应力的函数,即

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = f(\tau^{\alpha}, \tau_c^{\alpha}) \quad (6)$$

式中分切应力表达式为 $\tau^{\alpha} = \sigma: m^{\alpha} \otimes n^{\alpha}$, σ 为柯西应力张量。在晶体塑性框架中,式(6)被称为流动准则。表征材料所处状态的临界分切应力通常可以表示为所有滑移系的累积剪切应变($\Gamma =$

$\sum_{\alpha=1}^n \int |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt$)与滑移率的函数,即

$$\tau_c^{\alpha} = g(\Gamma, \dot{\gamma}^{\alpha}) \quad (7)$$

目前应用最为广泛的流动准则当属 Rice^[23]、Hutchinson^[25]提出的幂律函数关系

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}} \right|^m \text{sgn}(\tau^{\alpha}) \quad (8)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为参考滑移率; m 为应变速率敏感性指数,

当 $1/m \rightarrow 0$ 时可以近似地认为与材料的流动行为率无关。需要注意的是,只有 $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 为正数时才纳入考虑范围^[17]。由于不同的滑移系之间存在相互作用,第 β 个滑移系对第 α 个滑移系硬化行为的影响可由以下硬化模型给出,即

$$\dot{\tau}_c^{\alpha} = h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{\beta}| \quad (9)$$

式中 $h_{\alpha\beta}$ 为硬化模量,其常用形式为^[26]

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_0 \left(1 - \frac{\tau_c^{\beta}}{\tau_s} \right)^a \right] \quad (10)$$

式中: h_0 为初始硬化模量; τ_s 为饱和滑移阻力; $q_{\alpha\beta}$ 为自硬化与潜在硬化的强度系数; a 为硬化系数。

上述硬化模型在部分文献中均可找到相同形式^[27-29]或类似变体^[30-35]。Ghosh等^[36]和 Acharya等^[37]引入位错强化作用,将式(9)改进为

$$\dot{\tau}_c^{\alpha} = h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{\beta}| + \frac{k_0 \hat{a}^2 G^2 b}{2(\tau^{\alpha} - \tau_0^{\alpha})} \lambda^{\beta} |\dot{\gamma}^{\beta}| \quad (11)$$

式中: k_0 和 \hat{a} 为无量纲材料常数; G 为剪切模量; b 为 Burgers 矢量的模; τ_0^{α} 为初始滑移阻力; λ^{β} 为滑移面上晶体不相容度的度量值。有研究者^[38-41]利用双曲正割函数替代式(10)中的幂律函数,即

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_0 \text{sech}^2 \left| \frac{h_0 \Gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \right] \quad (12)$$

有研究者则用更一般的 Voce 定律替代式(10)来解释大塑性应变下应变率不消失的现象^[42-45],即

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} \left[h_s + \left(h_0 - h_s + \frac{h_0 h_s \Gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) e^{-h_0 \Gamma / (\tau_s - \tau_0)} \right] \quad (13)$$

式中 h_s 为大塑性应变下的硬化斜率。

在流动准则中引入其他变形机制,可将唯象本构模型扩展成不同形式。例如, Cailletaud^[46]在流动准则中引入背应力,在晶体尺度上引入随动硬化来解释循环变形行为,即

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left(\frac{|\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}| - g^{\alpha}}{K} \right)^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}) \quad (14)$$

式中: χ^{α} 为对应滑移系的背应力; g^{α} 和 K 为材料参数。此外, Horstemeyer等^[47]提出了相似的流动准则,即

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}}{g^{\alpha}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}) \quad (15)$$

对于式(14, 15)中的背应力演化, Cailletaud^[46]提出了一种线性的背应力演化方程,即

$$\dot{\chi}^{\alpha} = c \dot{\gamma}^{\alpha} - d |\dot{\gamma}^{\alpha}| \quad (16)$$

式中 c 和 d 为定义硬化率的材料参数。除了式(16)的简单硬化定律之外,应用最为广泛的背应力演化模型为 Armstrong-Frederick 模型(AF模型)^[48]。

Méric 等^[49]首次将宏观尺度的 AF 模型纳入晶体尺度,解释单晶镍基高温合金的 Bauschinger 效应,其表达式为

$$\dot{\chi}^{\alpha} = c\dot{\gamma}^{\alpha} - d\chi^{\alpha}|\dot{\gamma}^{\alpha}| \quad (17)$$

Hennessey 等^[50]将 Ohno-Wang 宏观模型(OW 模型)^[51]纳入晶体尺度,并取 OW 模型的前两项解释循环载荷中的棘轮与应力松弛现象,其表达式为

$$\dot{\chi}_i^{\alpha} = h_i\dot{\gamma}^{\alpha} - r_i\left(\frac{|\chi_i^{\alpha}|}{b_i}\right)^{m_i} \chi_i^{\alpha}|\dot{\gamma}^{\alpha}|, \dot{\chi}^{\alpha} = \sum_{i=1}^2 \dot{\chi}_i^{\alpha} \quad (18)$$

式中: h_i 、 r_i 和 b_i 为模型参数; m_i 为应力松弛速度参数。

早期对金属材料疲劳行为的研究以面心立方金属为主,对钛合金一类的 HCP 结构金属研究也仅局限于单一 α 相^[52]。随着生产工艺的进步,上述晶体塑性模型预测复杂微观结构合金的力学性能愈发困难。因此,研究者们着重于发展预测效果更好的晶体塑性本构模型。Mayeur 等^[53]提出考虑双相钛合金片层微观结构的晶体塑性本构模型,即

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left\langle \frac{|\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}| - k^{\alpha}}{D^{\alpha}} \right\rangle^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}) \quad (19)$$

式中: $\langle \cdot \rangle$ 为 Macauley 括号,其定义为当 $x < 0$ 时, $\langle x \rangle = 0$;当 $x > 0$ 时, $\langle x \rangle = x$ 。 k^{α} 为阈值应力,可表示为强化项与软化项的和,即

$$k^{\alpha} = \frac{k_y}{\sqrt{d}} + k_s^{\alpha} \quad (20)$$

式中: k_y 为 Hall-Petch 系数; d 为平均晶粒尺寸。式(20)的强化项由 Hall-Petch 效应贡献,且不参与演化,阈值应力的演化由软化项控制。软化项 k_s^{α} 的演化方程服从动态恢复关系,即

$$\dot{k}_s^{\alpha} = -\mu k_s^{\alpha} |\dot{\gamma}^{\alpha}| \quad (21)$$

式中 μ 为软化率系数。 D^{α} 为拖曳应力,其表达式为

$$D^{\alpha} = \tau_{\text{CRSS}}^{\alpha} - k_{t=0}^{\alpha} = \tau_{\text{CRSS}}^{\alpha} - \frac{k_y}{\sqrt{d}} - (k_s^{\alpha})_{t=0} \quad (22)$$

式中 $\dot{D}^{\alpha} = 0$,即拖曳应力不参与演化,而背应力 χ^{α} 的演化方程与式(17)一致。Kapoor 等^[54]提出了一种引入晶粒尺度残余应力的晶体塑性模型,并预测了增材制造 TC4 钛合金力学性能,其采用的流动准则与式(19)相同,而背应力则服从如下泰勒关系

$$\chi^{\alpha} = A\mu b^{\alpha} \sqrt{\rho_{\text{GND}}^{\alpha}} \quad (23)$$

式中: b^{α} 为 Burgers 矢量的模; $\rho_{\text{GND}}^{\alpha}$ 为几何必需位错密度(Geometrically necessary dislocation, GND); A 为材料常数; μ 为材料的各向同性剪切模量。

Ozturk 等^[55]将热效应与位错结合,提出了考虑热载荷与机械载荷条件的晶体塑性模型,即

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha} - \tau_{\text{GP}}^{\alpha}}{g^{\alpha} + \tau_{\text{GF}}^{\alpha}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sgn}(\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha} - \tau_{\text{GP}}^{\alpha}) \quad (24)$$

式中 $\tau_{\text{GP}}^{\alpha}$ 与 $\tau_{\text{GF}}^{\alpha}$ 为短程应力与长程应力引起的 GND 对滑移阻力的贡献,其表达式分别为

$$\tau_{\text{GP}}^{\alpha} = c_1^{\alpha} G^{\alpha} b^{\alpha} \sqrt{\rho_{\text{GP}}^{\alpha}}, \quad \tau_{\text{GF}}^{\alpha} = \frac{Q^{\alpha}}{c_2^{\alpha} b^{\alpha 2}} \sqrt{\rho_{\text{GF}}^{\alpha}} \quad (25)$$

式中: c_1^{α} 与 c_2^{α} 为材料常数; G^{α} 、 b^{α} 和 Q^{α} 分别为剪切模量、Burgers 矢量的模与激活能; $\rho_{\text{GP}}^{\alpha}$ 与 $\rho_{\text{GF}}^{\alpha}$ 分别为平行于滑移面与垂直于滑移面的 GND 分量。

上述本构模型中,描述材料状态的变量往往是临界分切应力与背应力。虽然唯象模型得到了不断发展,并引入了物理机制,但其本构模型的基础是经验性的黏塑性方程,缺乏对晶体内微观物理现象的详细描述。因此,为了弥补唯象模型的不足,基于物理机制的晶体塑性本构模型也得到了不断的发展。

1.2.2 基于物理机制的本构模型

相比于唯象模型,基于物理机制的本构模型与塑性变形微观机制有着更强物理联系,因此,其状态变量一般为微观物理量(如位错密度),且流动准则是基于微观变形机制的激活。此外,物理本构模型通常包括一些额外的微观结构信息作为输入,如初始位错密度、第二相的体积分数、位错与晶界相互作用、相变等。

物理模型的第一要素是塑性滑移率与位错运动之间的关系,早在 1934 年,Orowan^[56]就将滑移率与可移动位错(ρ_m^{α})、Burgers 矢量的模(b^{α})和平均位错速度(v^{α})联系起来,其方程为

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \rho_m^{\alpha} b^{\alpha} v^{\alpha} \quad (26)$$

位错运动是一个热激活过程,其运动速度受到各种短程或长程阻力的影响,Kocks 等^[57-58]基于过渡态理论(Transition-state theory)框架详细研究了短程相互作用下温度对位错滑移的影响。在其工作中,平均位错移动速度可以表示为

$$v^{\alpha} = l^{\alpha} \nu_0 \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT}\right) \quad (27)$$

式中: l^{α} 为滑移系中位错阻碍间的平均距离,也常被称为位错平均自由程,可以使用表达式 $l^{\alpha} = c_1/(\rho^{\alpha})^{0.5}$ 描述,其中 c_1 为材料常数; ν_0 为接触频率;指数项代表位错跳过短程阻碍的概率; k 为玻尔兹曼常数; T 为绝对温度; ΔG 为位错运动克服阻碍所需的吉布斯自由能,与滑移面所施加的分切应力(τ^{α})有关,其方程为

$$\Delta G = \Delta F \left[1 - \left\langle \frac{\tau_{\text{eff}}^{\alpha}}{\tau_c^{\alpha}} \right\rangle^p \right]^q \quad (28)$$

式中: ΔF 为无外力作用下克服阻碍所需的活化自由能; 系数 p 和 q 为模型参数, 分别代表阻碍强度与位错传播距离, 其取值范围分别为 $0 \leq p \leq 1$ 与 $1 \leq q \leq 2$; τ_c^α 为 0 K 时位错运动的阻碍强度; 有效应力 (τ_{eff}^α) 的表达式为 $\tau_{\text{eff}}^\alpha = |\tau^\alpha| - \tau_{\text{pass}}^\alpha$, 其中 $\tau_{\text{pass}}^\alpha$ 为可移动位错的非热阻力, 其演化方程为

$$\tau_{\text{pass}}^\alpha = c\mu b^\alpha \sqrt{\sum_{\beta=1}^{N_s} \xi^{\alpha\beta} \rho^\beta} \quad (29)$$

式中: c 为数值常数; μ 为剪切模量, $\xi^{\alpha\beta}$ 为滑移系交互系数, 一般通过经验系数^[59]或滑移系的几何关系^[18]来确定。综上所述, 完整的基于物理机制的晶体塑性本构模型的流动准则为

$$\dot{\gamma}^\alpha = \rho_m^\alpha b^\alpha l^\alpha \nu_0 \exp \left[-\frac{\Delta F}{kT} \left(1 - \left| \frac{|\tau^\alpha| - c\mu b^\alpha \sqrt{\sum_{\beta=1}^{N_s} \xi^{\alpha\beta} \rho^\beta}}{\tau_c^\alpha} \right|^p \right)^q \right] \quad (30)$$

式中位错密度 ρ^β 为晶体内各点单位体积位错长度的平均值, 也是物理类本构模型的内部状态变量。对于状态变量演化, Kocks 等^[58]认为硬化由位错的产生和湮灭之间的竞争所控制, 即该假设成为大部分文献中位错演化方程的基础^[60-69]。因此, Kocks 等^[70]提出如下演化方程, 即

$$\dot{\rho}^\alpha = \left[\frac{1}{l^\alpha} - 2y_c \rho^\alpha \right] |\dot{\gamma}^\alpha| \quad (31)$$

式中: 第一项在上文中已经详细介绍; 第二项则与动态恢复导致的位错湮灭相关; y_c 为位错湮灭的临界距离。

基于式(27)的原始模型, Ma 等^[62]和 Dunne 等^[71]提出了吉布斯自由能的简化形式, 即式(28)中的吉布斯自由能可以替换为

$$\Delta G = \Delta F - \tau^\alpha \Delta V \quad (32)$$

将式(32)代入式(27)可以得到

$$\dot{\gamma}^\alpha = \rho_m^\alpha b^\alpha l^\alpha \nu_0 \exp \left(-\frac{\Delta F}{kT} \right) \sinh \left(\frac{\tau^\alpha \Delta V^\alpha}{kT} \right) \quad (33)$$

式中 $\Delta V^\alpha = l^\alpha b^2$ 为激活体积, 也即晶体内部短程位错障碍相互作用的实际体积。

对于位错密度的演化, Ma 等^[62]和 Dunne 等^[71]则具有不同的见解。Ma 等^[63]认为式(26)中的可移动位错密度 (ρ_m^α) 能够承担部分外部塑性变形。为了移动, 可移动位错必须克服平行位错与林位错组成的应力场, 两种位错分别产生不同方向的阻碍

作用, 如图2所示。因此, 需要引入额外的位错密度, 即与滑移面平行的位错密度 (ρ_P^α) 和与滑移面正交的林位错密度 (ρ_F^α)。上述两种位错密度基于晶体内部不可移动位错密度 (ρ_{SSD}^α) 计算得到, 即

$$\rho_F^\alpha = \sum_{\beta=1}^N \chi^{\alpha\beta} \rho_{\text{SSD}}^\beta |\cos(\mathbf{n}^\alpha, \mathbf{t}^\beta)| \quad (34)$$

$$\rho_P^\alpha = \sum_{\beta=1}^N \chi^{\alpha\beta} \rho_{\text{SSD}}^\beta |\sin(\mathbf{n}^\alpha, \mathbf{t}^\beta)| \quad (35)$$

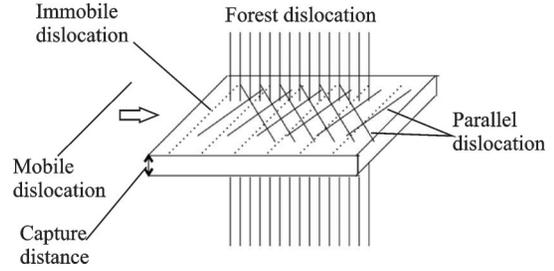


图2 位错滑移机制示意图^[63]

Fig.2 Schematic illustration for the slip mechanism^[63]

式中 $\chi^{\alpha\beta}$ 为滑移系交互系数, 包括自作用强度、共面作用强度、交滑移强度等^[24]。基于上述两种位错分解, 可移动位错密度可由标度律 (Scaling law) 给出, 即

$$\rho_m^\alpha = BT \sqrt{\rho_F^\alpha \rho_P^\alpha} \quad (36)$$

其中 B 的表达式为

$$B = \frac{2k_B}{c_1 c_2 c_3 G b^3} \quad (37)$$

式中 c_1 、 c_2 和 c_3 分别为位错密度相关的常数。在位错演化机制中, Ma 等^[62]考虑了4种演化过程, 即位错锁与位错偶极子形成对位错密度增加的过程, 以及非热与热激活湮灭的恢复过程, 4种过程的表达式总结如下:

(1) 位错锁形成

$$\dot{\rho}_{\text{SSD}}^{\alpha+} = \frac{c_4}{b} \sqrt{\rho_F^\alpha} \dot{\gamma}^\alpha \quad (38)$$

(2) 位错偶极子形成

$$\dot{\rho}_{\text{SSD}}^{\alpha+} = \frac{c_5}{b} d_{\text{dipole}}^\alpha \rho_m^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \quad (39)$$

$$d_{\text{dipole}}^\alpha = \frac{\sqrt{3} G b}{16\pi(1-\nu)} (|\tau^\alpha| - \tau_{\text{pass}}^\alpha)^{-1} \quad (40)$$

(3) 非热湮灭

$$\dot{\rho}_{\text{SSD}}^{\alpha-} = -c_6 \rho_{\text{SSD}}^\alpha \dot{\gamma}^\alpha \quad (41)$$

(4) 刃位错攀移导致的热湮灭

$$\dot{\rho}_{\text{SSD}}^{\alpha-} = -c_7 \frac{D_0 b^3}{k_B T} \exp \left(-\frac{Q_{\text{bulk}}}{k_B T} \right) (\rho_{\text{SSD}}^\alpha)^2 |\tau^\alpha| \left(\frac{\dot{\gamma}^\alpha}{\dot{\gamma}_{\text{ref}}^\alpha} \right)^{c_8} \quad (42)$$

式中: $c_4 \sim c_8$ 为拟合常数; d_{dipole}^α 为偶极子形成的临

界距离; ν 为泊松比; D_0 为扩散系数; Q_{bulk} 为位错攀移的激活能; $\dot{\gamma}_{\text{ref}}$ 为参考滑移率。除了上述 4 种过程, Ma 等^[63] 还加入了尺度效应, 即引入了与塑性应变梯度相关的 GND, 其表达式分别为

$$\dot{\rho}_{\text{GND}_s}^a = \frac{1}{b} [\nabla_x \times (\dot{\gamma}^a F_P^T n^a)] \cdot m^a \quad (43)$$

$$\dot{\rho}_{\text{GND}_{et}}^a = \frac{1}{b} [\nabla_x \times (\dot{\gamma}^a F_P^T n^a)] \cdot t^a \quad (44)$$

$$\dot{\rho}_{\text{GND}_{em}}^a = \frac{1}{b} [\nabla_x \times (\dot{\gamma}^a F_P^T n^a)] \cdot n^a \quad (45)$$

满足 $(\dot{\rho}_{\text{GND}}^a)^2 = (\dot{\rho}_{\text{GND}_s}^a)^2 + (\dot{\rho}_{\text{GND}_{et}}^a)^2 + (\dot{\rho}_{\text{GND}_{em}}^a)^2$ 。将上述位错密度加入林位错与平行位错中, 可以得到

$$\rho_F^a = \sum_{\beta=1}^n \chi^{\alpha\beta} \left[\rho_{\text{SSD}}^{\beta} |\cos(n^a, t^{\beta})| + \rho_{\text{GND}_s}^{\beta} |\cos(n^a, m^{\beta})| + \rho_{\text{GND}_{et}}^{\beta} |\cos(n^a, t^{\beta})| + \rho_{\text{GND}_{em}}^{\beta} |\cos(n^a, n^{\beta})| \right] \quad (46)$$

$$\rho_P^a = \sum_{\beta=1}^n \chi^{\alpha\beta} \left[\rho_{\text{SSD}}^{\beta} |\sin(n^a, t^{\beta})| + \rho_{\text{GND}_s}^{\beta} |\sin(n^a, m^{\beta})| + \rho_{\text{GND}_{et}}^{\beta} |\sin(n^a, t^{\beta})| + \rho_{\text{GND}_{em}}^{\beta} |\sin(n^a, n^{\beta})| \right] \quad (47)$$

至此, 引入 GND 描述应变梯度引起尺寸效应的模型已经建立。

Dunne 等^[71] 则引入了两种位错演化机制: 位错滑移与位错钉扎, 其中位错滑移只在基面 (Basal) 与棱柱面 (Prismatic) 发生, 位错钉扎则通过 GND 的产生而发生。因此, 其流动准则为

$$\dot{\gamma}^a = \rho b^2 \nu \exp\left(-\frac{\Delta F}{kT}\right) \sinh\left(\frac{\tau^a \Delta V}{kT}\right) \quad (48)$$

式中激活体积 (ΔV) 与钉扎距离 (l) 有关, 钉扎距离是位错密度的函数, 即 $\Delta V = lb^2$, $l = 1/(\rho_G)^{0.5}$ 。同时, 因为 GND 密度在几何上是相关的^[72], 该模型与尺度效应具有很强的关联性。Busso 等^[72] 给出了 GND 密度向量演化的增量形式

$$\Delta \rho_G^a = \frac{\Delta \gamma^a}{b} \text{curl}[n^a F^P] \quad (49)$$

此位错密度向量可以分解为滑移方向 (s^a) 上的螺位错线密度, 以及平面法向 (n^a) 和线方向 (t^a) 的刃位错线密度。Dunne 等^[71] 为了简化位错演化方程, 将所有激活滑移系上的位错密度叠加, 并假设位错密度存在于所有的滑移系上, 其表达式为

$$\sum (\Delta \rho_{en}^a n^a + \Delta \rho_{et}^a t^a + \Delta \rho_s^a s^a) = \sum \Delta \rho_G^a = \Delta \rho_G \quad (50)$$

上述基于 Orowan 方程的本构模型只是物理模型中的一部分, Beyerlein 等^[64] 基于传统的黏塑性流动准则 (式 (8)), 提出了一种新型的物理本构方程, 并成功在 HCP 金属、BCC 金属及 HCP/BCC 双相金属上应用^[65], 其滑移阻力表达式为

$$\tau_c^a = \tau_{0,f}^a + \tau_{0,HP}^a + \tau_{\text{for}}^a + \tau_{\text{sub}}^a \quad (51)$$

式中: $\tau_{0,f}^a$ 为摩擦应力 (如 Peierls 应力、间隙、析出物和初始位错密度); $\tau_{0,HP}^a$ 为阻碍 (如晶界或孪晶界) 影响项; τ_{for}^a 与 τ_{sub}^a 分别为晶粒内位错相互作用贡献, 前者来自晶粒中空间随机分布的林位错密度 (ρ_{for}^a), 后者来自次边界等机制导致的次结构位错密度 (ρ_{sub}^a)。不同于前两项, τ_{for}^a 与 τ_{sub}^a 演化依赖于位错的演化。Beyerlein 等^[64] 认为 $\tau_{0,HP}^a$ 由晶界阻力导致, 并认为服从如下 Hall-Petch 关系

$$\tau_{0,HP}^a = \mu H^a \sqrt{\frac{b^a}{d_g}} \quad (52)$$

式中: H^a 为 Hall-Petch 参数; d_g 为平均晶粒尺寸。应力 τ_{for}^a 与 τ_{sub}^a 随着位错密度的增加而增加, 其表达式为

$$\tau_{\text{for}}^a = \chi b^a \mu^a \sqrt{\rho_{\text{for}}^a} \quad (53)$$

$$\tau_{\text{sub}}^a = k_{\text{sub}} \mu^a b^a \sqrt{\rho_{\text{sub}}^a} \lg\left(\frac{1}{b^a \sqrt{\rho_{\text{sub}}^a}}\right) \quad (54)$$

式中: χ 为位错相互作用参数; k_{sub} 为模型参数。式 (53) 中林位错密度的演化方程为

$$\Delta \rho_{\text{for}}^a = k_1 \sqrt{\rho_{\text{for}}^a} |\Delta \gamma^a| - \Delta \rho_{\text{rem}}^a \quad (55)$$

式中: k_1 为与滑移模式有关的林位错生成系数; $\Delta \rho_{\text{rem}}^a$ 为林位错密度的移除量, 其表达式为

$$\Delta \rho_{\text{rem}}^a = \frac{\chi b^a}{G^a} k_1 \left[1 - \frac{kT}{D^a (b^a)^3} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{\dot{\epsilon}_0}\right) \right] |\Delta \gamma^a| \quad (56)$$

式中: G^a 为激活能; D^a 为与滑移模式有关的推进因子; $\dot{\epsilon}$ 为施加的应变率; $\dot{\epsilon}_0$ 为参考滑移率。次结构位错密度的演化方程则为

$$\Delta \rho_{\text{sub}}^a = \sum_a f^a b^a \Delta \rho_{\text{rem}}^a \sqrt{\rho_{\text{sub}}^a} \quad (57)$$

式中 f^a 为位错生成系数。次结构位错密度被认为会对所有滑移系统上的林位错演化产生影响, 因此, 这里需要对所有滑移系统上次结构密度进行求和。

2 晶体塑性模型在疲劳寿命预测中的应用

金属的疲劳裂纹萌生是一个多尺度过程, 包含纳米尺度的位错滑移和位错相互作用, 以及微米尺度的特殊位错形态的形成, 这些位错作用导致塑性变形在晶粒的滑移带上局部化, 同时疲劳裂纹萌生的过程非常依赖微观结构的局部细节 (晶粒尺寸、孪晶、织构等) 以及缺陷 (孔隙、夹杂物等) 的存在。因此, 微观结构对疲劳性能的影响不可忽视。

疲劳裂纹萌生通常由局部的损伤导致, 其主要取决于微观结构特征的随机性和非均匀性。这使得“名义上”相同多晶体之间存在较大的分散性, 在

微观结构和疲劳性能之间建立精确的关联,变得非常困难。显然,只有考虑到微观结构的模拟技术,才能够提供微观结构和疲劳性能之间的联系,这也是微观结构敏感的疲劳计算模型^[73-76]成为过去20年中引起更多关注的原因之一,其提供了一个独特的框架来理解微观结构和缺陷对金属材料疲劳行为的影响。图3^[77]描述了通过晶体塑性模型预测多晶金属合金疲劳行为的框架。可借助不同开源代码(如DREAM.3D、Neper等)建立多晶材料微观结构的代表体积元(Representative volume element, RVE)^[78-79]。其中,DREAM.3D可以根据

EBSD数据或统计函数进行模型重构,快速生成可视化的大型三维多晶RVE模型;Neper则可以通过用户编写脚本,建立包含片层等复杂微观结构的RVE模型,具有划分多种有限元网格的能力。通过对RVE力学行为的数值模拟,获得循环变形过程中的全微观力学场。单晶本构模型用于解释金属合金循环变形现象,即Bauschinger效应、棘轮效应和循环软化/硬化等,其参数通常需要与试验的循环应力-应变曲线进行比较来校准,校准过程可以通过基于目标误差函数构建的试错方法或优化算法完成^[80]。

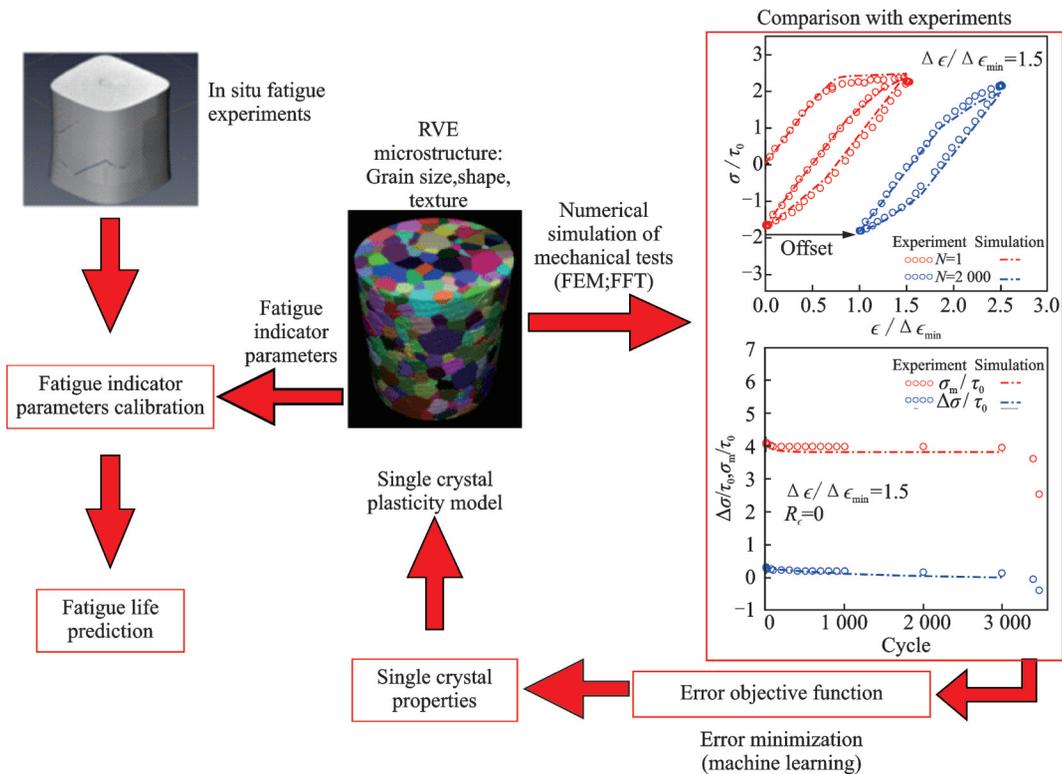


图3 利用晶体塑性理论预测多晶金属合金疲劳寿命的试验-模拟耦合方法^[77]

Fig.3 Coupled experiment-simulation strategy for predicting the fatigue life of polycrystalline metallic alloys using crystal plasticity theory^[77]

获得CPFEM参数以及预测疲劳寿命的一个关键因素是多晶体稳定的循环应力应变曲线。通常,一个稳定的疲劳行为可能需要几十个循环或几千个循环才能达到,这取决于金属类型和加载条件。在高周疲劳的情况下,巨大的计算成本使得无法有效模拟RVE的力学响应,因此,需要开发一种高效的疲劳寿命预测模型。Ghosh等^[81]提出一种用于加速晶体塑性有限元疲劳行为模拟的小波变换多时间尺度算法,该算法可以将模拟疲劳周期数大幅减少。

一旦稳定的力学响应通过CPFEM模拟确定,疲劳寿命就可以基于疲劳指标参数(Fatigue indicator parameter, FIP)预测得到。文献中报道了不同的

FIP,它们通常作为控制裂纹形成的主要驱动力,将唯象晶体塑性模型与疲劳寿命的某个阶段(如裂纹萌生和小裂纹扩展)联系起来。目前,常见FIP的计算方法与一个疲劳周期中某些变量有关,如每个循环的累积塑性应变(Plastic strain accumulation, PSA)^[82-83]

$$P = \int_{\text{cyc}} \sqrt{\frac{2}{3}} L_p : L_p dt \quad (58)$$

或最大塑性剪应变^[84-85]

$$\Delta\gamma = \max_{\alpha} \left\{ \int_{\text{cyc}} |\dot{\gamma}^{\alpha}| dt \right\} \quad (59)$$

上述两种FIP仅适用于局部塑性应变场。另外,Fatemi-Socie(FS)提出的FIP计算公式为^[86]

$$FS = \max_{\alpha} \left\{ \frac{\Delta\gamma^{\alpha}}{2} \left(1 + k \frac{\sigma_n^{\alpha}}{\sigma_y} \right) \right\} \quad (60)$$

式中: k 为数值常数; σ_y 为材料屈服应力; σ_n^{α} 和 $\Delta\gamma^{\alpha}$ 分别为滑移面最大法向应力和剪切应变变程。此 FIP 最初是为了解释实验室试样的疲劳行为而开发^[87],但在高周疲劳模拟中,它被认为是裂纹萌生的驱动力^[88-89]。其他流行的 FIP 还有 Charkaluk 等^[90]提出的循环耗散能

$$W = \max_k \left\{ \int_{cyc} \tau^k \dot{\gamma}^k dt \right\} \quad (61)$$

和 Wan 等^[91]提出的能量存储密度

$$G = \int_{cyc} \xi \frac{\sigma: \dot{\epsilon}_p}{\sqrt{\rho_{SSD} + \rho_{GND}}} dt \quad (62)$$

式中 ξ 代表一个循环中通过位错结构而累积的外部功系数。

上述 5 种 FIP 中,能量类 FIP 的应用较少,文献中更为常见的是累积应变与应力类型^[92-96]。在文献中还可以找到其他类型的 FIP^[73-74,97],此处不再赘述。Yaghoobi 等^[98]发展了集成 CPFEM 和 FIP 的程序代码,并提出了 FIP 平均值的子带(sub-band)计算方法,具体流程如图 4 所示。易敏等^[99]采用 CPFEM、FIP 和极值概率理论,研究了增

材制造金属的疲劳分散性。Li 等^[100]探究 TA15 钛合金的低周循环疲劳变形机制,将累积塑性应变与能量耗散 FIP 预测其疲劳寿命并对比了预测精度,发现两种 FIP 的预测结果基本相同,但随着应变振幅增加,前者的预测精度略高于后者,如图 5 所示。Zhang 等^[101]采用累积塑性剪切应变类 FIP,结合晶体塑性及扩展有限元法,研究了高温(650 °C)与室温(24 °C)下[111]方向单晶镍基高温合金的低周疲劳裂纹扩展的行为,并对其裂纹扩展寿命进行预测,随着循环次数增加,晶体塑性模型计算结果与实验结果具有较好的一致性,如图 6 所示。Prastiti 等^[102]采用 CPFEM 和离散位错方法研究了能量存储密度 FIP 和位错构型能对裂纹成核位置的预测能力,结果表明,两种量均能识别疲劳裂纹成核的位置,但是能量存储密度 FIP 预测结果更加准确。从不同类型 FIP 中选择一个来预测金属疲劳寿命并没有明确的规律,研究者们通常根据所考虑的长度尺度、金属特性及疲劳阶段(萌生/小裂纹扩展)来选择关联性更强的 FIP。例如,累积塑性应变类型 FIP 更能发现单晶或单轴载荷下驻留滑移带的形成^[82],而对于多晶及多轴载荷,应力对驻留滑移带和小裂纹扩展的作用则更强,包含塑性滑移的应力类型 FIP 则更加适用^[92]。

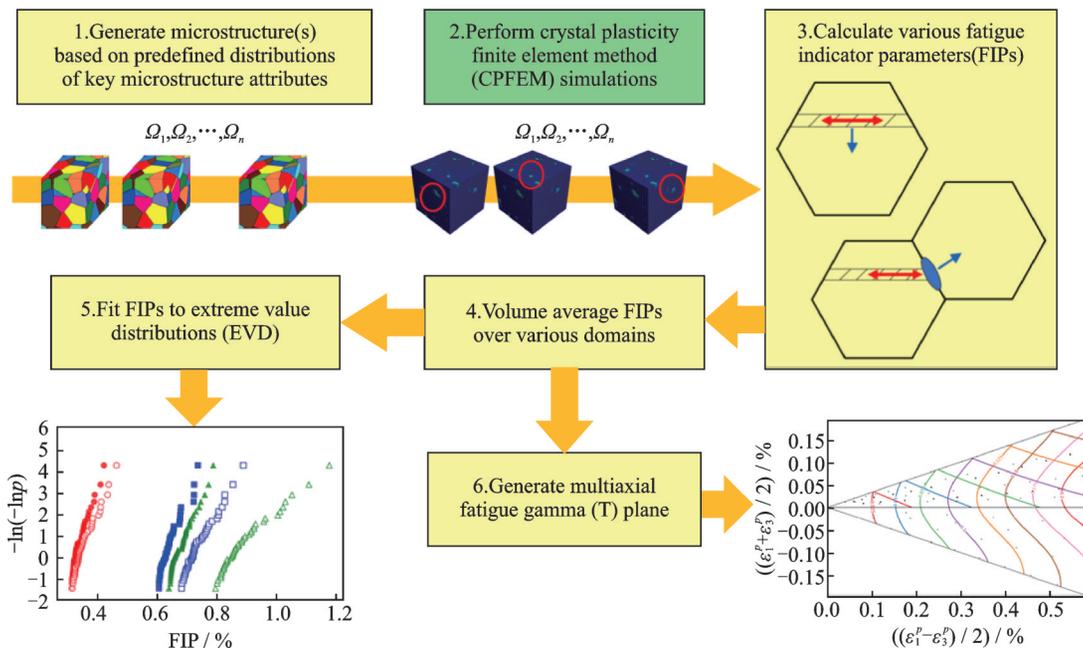


图 4 PRISMS-Fatigue 计算模块流程图^[98-99]
Fig.4 Flowchart of PRISMS-Fatigue module^[98-99]

CPFEM 预测疲劳寿命另一个关键因素是建立 FIP 和疲劳寿命不同阶段之间的联系。在这方面,基于微观力学的疲劳寿命预测模型可以大致分为两类。第一类中,FIP 和疲劳裂纹萌生和扩展的数个阶段之间建立联系;第二类假设大部分的疲劳寿命是在裂纹的萌生阶段,FIP 和疲劳寿命之间建

立直接联系。

第一类模型由 McDowell 等^[103]提出,他们认为疲劳寿命至少有 3 个阶段:裂纹萌生(Crack incubation, Crack Inc.)、微裂纹(Microstructurally small crack, MSC)/物理小裂纹(Physically small crack, PSC)扩展和长裂纹扩展(Long crack, LC)。总疲劳寿

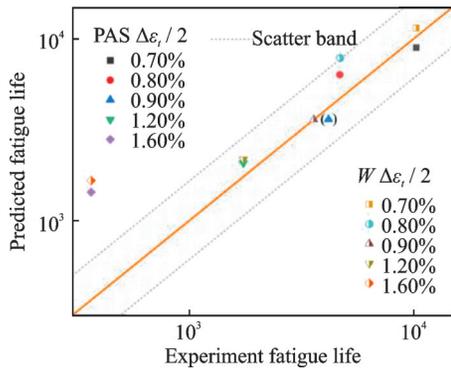


图5 基于两种FIP的TA15钛合金疲劳寿命预测对比: 累积塑性应变和累积能量耗散^[100]

Fig.5 Fatigue life prediction of TA15 titanium alloy by two kinds of fatigue indicator parameters: PSA and accumulated energy dissipation^[100]

命为

$$N = N_{inc} + N_{MSC/PSC} + N_{LC} \quad (63)$$

式中: N_{inc} 为在微观结构中形成裂纹核的疲劳循环次数,其长度是某些微观结构长度尺度(例如晶粒尺寸)的数量级; $N_{MSC/PSC}$ 代表裂纹从成核生长到其长度为晶粒尺寸3~10倍的循环次数,这两个阶段的裂纹萌生和扩展依赖于微观结构(晶粒尺寸、形状、织构、第二相的空间分布等); N_{LC} 为长裂纹扩展相关的循环次数,这一阶段几乎不依赖于微观结构,可以用线弹性断裂力学(Linear elastic fracture mechanics, LEFM)的经典裂纹扩展理论来解释。综上,CPFEM在该框架中用于确定 N_{inc} 和 $N_{MSC/PSC}$,通过建立不同形式的FIP来评估疲劳裂纹各个阶段的裂纹驱动力。Przybyla等^[104]基于此方法,对IN100镍基高温合金圆形缺口试样的高周疲劳及超高周疲劳寿命进行预测,并对比分析了不同缺口尺寸下疲劳寿命的差异,如图7所示。其中,疲劳裂纹萌

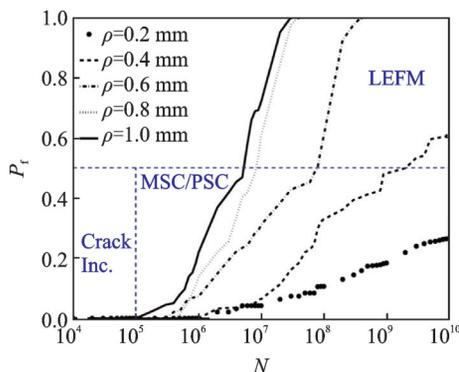


图7 各种缺口半径的IN100圆形试样累积分布函数(应变幅0.252%,应变比-1,温度650℃)^[104]

Fig.7 Cumulative distribution function of IN100 nickel-based superalloy circular specimens with various notch radii (0.252% of strain amplitude, -1 of strain ratio, 650℃ of temperature)^[104]

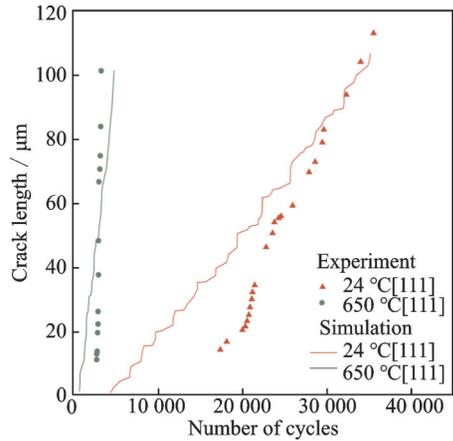


图6 [111]方向MD2镍基单晶高温合金裂纹扩展寿命对比:24℃和650℃^[101]

Fig.6 Comparison of crack propagation life of MD2 nickel-based single-crystal superalloy in direction [111]: 24℃ and 650℃^[101]

生阶段与微裂纹扩展阶段分别使用了Fatemi-Socie类FIP及累积剪切应变类FIP的改进变体,长裂纹扩展寿命则采用了线弹性断裂力学方法。

Anahid等^[105]提出一种非局部的双相钛合金驻留疲劳裂纹萌生准则,该模型可解释滑移对多个滑移系统的累积影响,并涉及晶粒中演变的混合模式应力以及相邻晶粒中的位错堆积,其裂纹萌生的有效应力为

$$T_{eff} = \sqrt{\langle T_n \rangle^2 + \beta T_t^2} \geq \frac{K_c}{\sqrt{\pi c}} \quad (64)$$

式中: T_n 为滑移面上的法向应力; T_t 为切向应力; K_c 为混合应力强度因子临界值; c 为裂纹长度,其表达式为

$$c = \frac{G}{8\pi(1-\nu)\gamma_s} B^2 \quad (65)$$

式中: G 、 ν 和 γ_s 分别为剪切模量、泊松比和表面能; B 为裂纹张开位移,其计算方式为 $B = \int_{\Omega} \mathbf{A} \cdot \mathbf{n} d\Omega$,

其中 Ω 为参考面。Kirane等^[106]采用式(64)对Ti-6242钛合金低周驻留疲劳寿命进行预测,结果如图8所示。在冷驻留疲劳下,Ti-6242中的裂纹萌生由相邻软晶粒载荷脱落和硬晶粒应力集中引起,与试验结果对比(图9),该模型具有非常好的预测效果。

Tanaka和Mura^[107]认为在循环载荷下,塑性变形在循环过程中累积,不可逆滑移导致低能量位错排列,这个过程使得单个晶粒内应变局部化并形成驻留滑移带。基于此假设,他们将FIP与基于位错力学的裂纹萌生寿命联系起来,即

$$N_c = \frac{8GW_s}{\pi(1-\nu)d(\Delta\tau - 2\tau_c)^2} \quad (66)$$

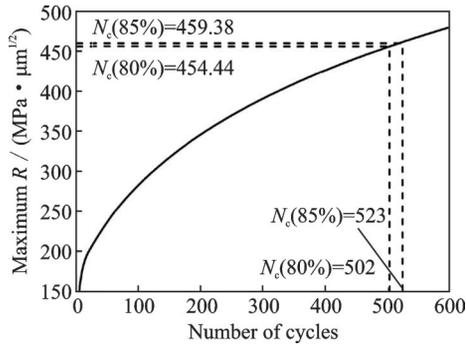


图 8 Ti-6242 钛合金微观结构有限元模型中应力强度因子 R 的最大值随循环次数的演化^[106]

Fig.8 Evolution of the maximum value of stress intensity factor R with the number of cycles in finite element model of Ti-6242 titanium alloy microstructure^[106]

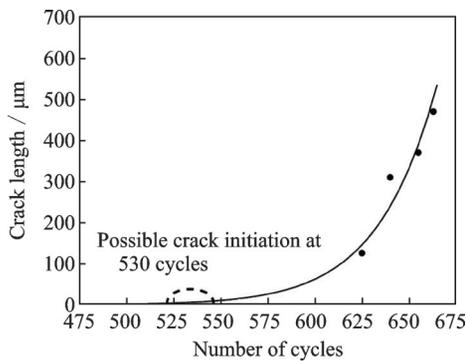


图 9 Ti-6242 钛合金微观结构中裂纹长度与循环次数的关系^[106]

Fig.9 Relationship between crack length and cycle number in Ti-6242 titanium alloy microstructure^[106]

式中: W_s 为单位面积起裂能; d 为滑移带长度; τ_c 为滑移带上的滑移阻力; $\Delta\tau$ 为滑移面上分切应力变程。Kramberger 等^[108] 基于 Tanaka-Mura 微裂纹萌生准则, 对热切割马氏体钢 RVE 模型的疲劳裂纹萌生及宏观裂纹形成进行了多尺度模拟, 如图 10 所示。从图中可以看出, 模型的粗糙表面附近发生了应力集中, 且在附近形成了微裂纹; 一段时间后, 新的微裂纹在已形成裂纹附近成核, 并逐步合并成宏观裂纹。图 11 中的 $S-N$ 曲线表明, Tanaka-Mura 模型的预测结果与实验结果具有很好的吻合度。研究者们还提出了使用额外参数(如 Burgers 矢量的模^[109]、驻留滑移带宽度^[110]和位错不可逆参数^[111])的该模型的其他变体。

Fine 和 Bhat^[112] 认为疲劳裂纹萌生与相变概念类似, 由于产生新表面需要能量输入, 因此, 在疲劳裂纹萌生过程中必须克服能量障碍。另一方面, 微裂纹的形成导致弹性能释放, 并在裂纹核位置处累积晶格缺陷, 当累积的能量达到临界值时, 疲劳裂纹会自发产生。因此, 他们提出的模型为

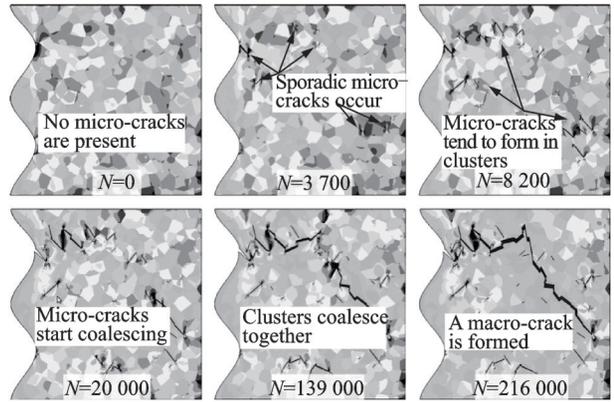


图 10 600 MPa 载荷下的马氏体钢微裂纹模拟^[108]

Fig.10 Simulation of microcracks in martensitic steel under 600 MPa load^[108]

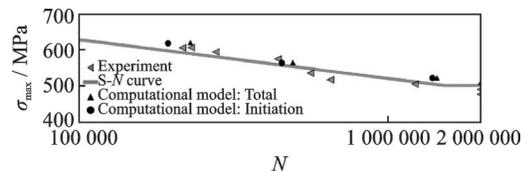


图 11 数值和试验结果的 $S-N$ 曲线^[108]

Fig.11 $S-N$ curve from numerical and test results^[108]

$$N = \frac{\pi E \gamma_s - 4 \sigma^2 c (1 - \nu^2)}{\pi E f t_m (\Delta\tau/2) (\Delta\gamma_p/2)} \quad (67)$$

式中: E 和 γ_s 分别为杨氏模量和表面能; σ 为疲劳应力幅; c 为虚拟裂纹半径; f 为能量效率因子; t_m 为最大驻留滑移带宽度; $\Delta\tau$ 与 $\Delta\gamma_p$ 分别为局部分切应力变程和局部塑性剪应变变程。Li 等^[113] 将式 (67) 与含背应力的晶体塑性模型结合, 研究 AA7075 铝合金的力学行为。结果表明(图 12), 对于给定的能量效率因子范围, 可以获得准确的寿命预测范围。

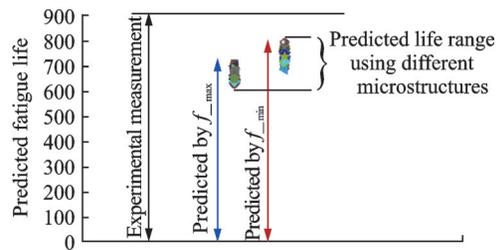


图 12 基于最大和最小能量效率因子的 AA7075 铝合金疲劳裂纹萌生寿命预测和实验结果^[113]

Fig.12 Predicted and experimental fatigue crack initiation life of AA7075 aluminum alloy by using the maximum and minimum energy efficiency factors^[113]

上述裂纹萌生或短裂纹扩展模型中出现的参数, 必须通过与一些实验数据进行比较来获得。然而, 校准模型具有一定误差, 产生误差的一个重要原因是, 难以通过试验确定在小裂纹区域中裂纹成

核或裂纹扩展所对应的实际疲劳循环次数,可用的实验数据大部分仅限于宏观疲劳试验,难以检测裂纹萌生。另外,基于CPFEM的疲劳寿命预测方法往往对RVE具有依赖性。相比于真实的微观结构,RVE中的晶粒数量要小得多,基于相同RVE微观结构所预测的疲劳寿命可能会与实际样品的寿命存在较大误差,通过大量不同RVE所预测疲劳寿命的统计分析,是减小这一误差的方法之一。

3 总结与展望

在过去20年里,晶体塑性理论模型得到了快速发展,唯象模型和基于物理机制的模型均愈发成熟,塑性变形微观机制的考虑愈发全面,为不同载荷条件下不同类型金属的力学行为及微观机理预测提供了丰富多样的选择。同时,对金属微观结构RVE进行全场模拟的CPFEM已经成为一种成熟的技术,使得在考虑微观结构影响下模拟多晶金属材料的力学行为成为可能。结合FIP和寿命评估准则,CPFEM在金属疲劳寿命预测方面也展现出应用前景。然而,要想实现晶体塑性理论和CPFEM在具体工程问题中的应用,并用于处理复杂服役环境下的金属力学行为预测,以下几点仍是未来发展趋势和有待加强的研究方向。

(1) 发展CPFEM的高效算法。计算量大是当前CPFEM面向真实工程应用的挑战之一,由于晶体塑性本构是从单晶力学行为出发,对大量晶粒进行模拟会大幅增加计算量,需要发展新的高效计算方法,比如借助机器学习等人工智能算法来提高预测效率。

(2) 建立成熟的CPFEM和疲劳寿命预测软件平台。目前,晶体塑性模型的数值计算主要依靠研究者的开源代码实现,不同开源代码的计算方法不一,功能实现也有所侧重,无法直接预测疲劳寿命,尚未形成较为成熟的软件平台。

(3) CPFEM与先进表征技术和人工智能相结合。采用先进表征技术和人工智能算法将金属材料的微观结构信息在RVE模型中精准重构,建立更加真实反映材料微观结构的高分辨率RVE模型,有助于精准预测力学行为和解释微观变形机制。

(4) 建立包含多场耦合、高应变率、孪晶、相变、晶界作用等复杂微观物理机制的晶体塑性理论模型。随着航空航天金属材料服役环境的日趋复杂,多场(力、热、化、电、磁等)及强动载荷对晶体塑性模型提出了挑战,孪晶、相变、晶界相互作用等物理机制对金属力学性能的影响也不可忽视,需要发

展适用于多场耦合、高应变率和微结构相互作用的晶体塑性理论模型及相关高效算法。

(5) 优化CPFEM预测疲劳寿命的准则。目前基于CPFEM预测疲劳寿命的主流方法是采用FIP和Tanaka-Mura准则,预测精度随材料体系和载荷条件的变化而波动较大,需要进一步发展和优化CPFEM预测疲劳寿命的准则。

(6) CPFEM与其他新兴方法的结合。例如与相场方法或近场动力学结合,形成的晶体塑性模型可以对晶粒尺度的裂纹扩展及孪晶演化等行为进行模拟,并融入传统晶体塑性模型无法考虑的其他微结构因素。

(7) 面向新型金属材料,比如增材制造金属、TiAl金属间化合物等,发展新的晶体塑性理论和CPFEM。

参考文献:

- [1] 张士宏,程明,宋鸿武,等. 航空航天复杂曲面构件精密成形技术的研究进展[J]. 南京航空航天大学学报, 2020, 52(1): 1-11.
ZHANG Shihong, CHENG Ming, SONG Hongwu, et al. Research progress on precision forming technology for complex curved surface components in aerospace [J]. Journal of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2020, 52(1): 1-11.
- [2] 詹梅,李宏伟,孙新新,等. 基于晶体塑性的难变形材料不均匀变形多尺度建模研究进展[J]. 塑性工程学报, 2018, 25(1): 1-14.
ZHAN Mei, LI Hongwei, SUN Xinxin, et al. Research progress of the multi-scale modeling of heterogeneous deformation for hard-to-deform material based on crystal plasticity [J]. Journal of Plasticity Engineering, 2018, 25(1): 1-14.
- [3] DUMONTET N, CONNÉTABLE D, MALARD B, et al. Elastic properties of the α' martensitic phase in the Ti-6Al-4V alloy obtained by additive manufacturing [J]. Scripta Materialia, 2019, 167: 115-119.
- [4] TSURU T, ITAKURA M, YAMAGUCHI M, et al. Dislocation core structure and motion in pure titanium and titanium alloys: A first-principles study [J]. Computational Materials Science, 2022. DOI: 10.1016/j.commatsci.2021.111081.
- [5] FENG Z, YANG Y, XU Z, et al. Effect of martensitic transformation on elastic modulus anisotropy of Ti-6Al-4V alloy [J]. Materials Research, 2018, 21(4): 1-8.
- [6] MA K, REN S, SUN H, et al. Molecular dynamics simulations of TC4 titanium alloy with mechanical property calculations after various heat treatments [J]. Physical Chemistry Chemical Physics, 2022, 24(41):

- 25367-25372.
- [7] ZENG X, HAN T, GUO Y, et al. Molecular dynamics modeling of crack propagation in titanium alloys by using an experiment-based Monte Carlo model[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2018, 190: 120-133.
- [8] NARESH G, RAJASEKARAN G. Characterization and applications of titanium alloy with nickel and niobium based shape memory alloys by molecular dynamic simulation—A review [J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2020, 912(5): 052027.
- [9] ZHANG H, OU X, WEI B, et al. Strain direction dependency of deformation mechanisms in an HCP-Ti crystalline by molecular dynamics simulations[J]. *Computational Materials Science*, 2020, 172: 109328.
- [10] LAVENSTEIN S, EL-AWADY J A. Micro-scale fatigue mechanisms in metals: Insights gained from small-scale experiments and discrete dislocation dynamics simulations[J]. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 2019, 23(5): 100765.
- [11] HUANG M, LI Z, TONG J. The influence of dislocation climb on the mechanical behavior of polycrystals and grain size effect at elevated temperature[J]. *International Journal of Plasticity*, 2014, 61: 112-127.
- [12] XU Y, FOX K, RUGG D, et al. Cyclic plasticity and thermomechanical alleviation in titanium alloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 134: 102753.
- [13] BAI J, BAI Q, TONG Z. Dislocation dynamics-based modeling and simulations of subsurface damages microstructure of orthogonal cutting of titanium alloy [J]. *Micromachines*, 2017, 8(10): 309-321.
- [14] SHARMA D, PANDEY V B, SINGH I V, et al. A polygonal FEM and continuum damage mechanics based framework for stochastic simulation of fatigue life scatter in duplex microstructure titanium alloys[J]. *Mechanics of Materials*, 2021, 163: 104071.
- [15] TAYLOR G I. Plastic strain in metals[J]. *The Journal of the Institute of Metals*, 1938, 62: 307-324.
- [16] TAYLOR G I. The mechanism of plastic deformation of crystals. Part I.—Theoretical[J]. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A*, 1934, 145: 362-387.
- [17] PEIRCE D, ASARO R J, NEEDLEMAN A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals[J]. *Acta Metallurgica*, 1982, 30(6): 1087-1119.
- [18] ASARO R J. Crystal plasticity[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1983, 50(4b): 921-934.
- [19] HAN C S, GAO H, HUANG Y, et al. Mechanism-based strain gradient crystal plasticity—I. Theory[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(5): 1188-1203.
- [20] ZHANG M, LI J, TANG B, et al. Quantification of α phase strengthening in titanium alloys: Crystal plasticity model incorporating α/β heterointerfaces[J]. *International Journal of Plasticity*, 2022, 158: 103444.
- [21] LAHIRI A, SHANTHRAJ P, ROTERS F. Understanding the mechanisms of electroplasticity from a crystal plasticity perspective[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2019, 27: 085006.
- [22] YALCINKAYA T, BREKELMANS W A M, GEERS M G D. BCC single crystal plasticity modeling and its experimental identification[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2008, 16: 085007.
- [23] HILL R, RICE J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1972, 20(6): 401-413.
- [24] ROTERS F, EISENLOHR P, BIELER T R, et al. Crystal plasticity finite element methods: In materials science and engineering[M]. [S.l.]: Wiley-VCH, 2010.
- [25] HUTCHINSON J W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials[J]. *Proceedings of the Royal Society of London, A. Mathematical and Physical Sciences*, 1976, 348(1652): 101-127.
- [26] KALIDINDI S R, BRONKHORST C A, ANAND L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1992, 40(3): 537-569.
- [27] ZENG Z, LI X, XU D, et al. Gradient plasticity in gradient nano-grained metals[J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2016, 8: 213-219.
- [28] KALIDINDI S R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46(2): 267-271.
- [29] VENKATARAMANI G, KIRANE K, GHOSH S. Microstructural parameters affecting creep induced load shedding in Ti-6242 by a size dependent crystal plasticity FE model[J]. *International Journal of Plasticity*, 2008, 24(3): 428-454.
- [30] ZHANG M, TANG B, YANG R, et al. Combined crystal plasticity simulations and experiments for parameter identification: Application to near- β titanium alloy[J]. *Journal of Materials Science*, 2020, 55(30): 15043-15055.
- [31] VENKATARAMANI G, GHOSH S, MILLS M. A size-dependent crystal plasticity finite-element model for creep and load shedding in polycrystalline titanium alloys[J]. *Acta Materialia*, 2007, 55(11): 3971-3986.
- [32] TANG B, ZHANG M, YANG R, et al. Microplas-

- ticity behavior study of equiaxed near- β titanium alloy under high-cycle fatigue loading: Crystal plasticity simulations and experiments[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2019, 8(6): 6146-6157.
- [33] ASIM U B, SIDDIQ M A, KARTAL M E. Representative volume element (RVE) based crystal plasticity study of void growth on phase boundary in titanium alloys[J]. *Computational Materials Science*, 2019, 161: 346-350.
- [34] ROVINELLI A, SANGID M D, PROUDHON H, et al. Predicting the 3D fatigue crack growth rate of small cracks using multimodal data via Bayesian networks: In-situ experiments and crystal plasticity simulations[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 115: 208-229.
- [35] IBRAGIMOVA O, BRAHME A, MUHAMMAD W, et al. A convolutional neural network based crystal plasticity finite element framework to predict localised deformation in metals[J]. *International Journal of Plasticity*, 2022, 157: 103374.
- [36] GHOSH S, CHAKRABORTY P. Microstructure and load sensitive fatigue crack nucleation in Ti-6242 using accelerated crystal plasticity FEM simulations [J]. *International Journal of Fatigue*, 2013, 48: 231-246.
- [37] ACHARYA A, BEAUDOIN A J. Grain-size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(10): 2213-2230.
- [38] DEKA D, JOSEPH D S, GHOSH S, et al. Crystal plasticity modeling of deformation and creep in polycrystalline Ti-6242[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Materials Science*, 2006, 37(5): 1371-1388.
- [39] WANG S, LI P, WU Y, et al. Micromechanical behavior of Ti-2Al-2.5Zr alloy under cyclic loading using crystal plasticity modeling[J]. *International Journal of Fatigue*, 2022, 161: 106890.
- [40] LI K, HAN X, TANG B, et al. Effect of microvoids on microplasticity behavior of dual-phase titanium alloy under high cyclic loading (I): Crystal plasticity analysis[J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2022, 32(2): 513-523.
- [41] MCCARTHY O J, MCGARRY J P, LEEN S B. Micro-mechanical modelling of fretting fatigue crack initiation and wear in Ti-6Al-4V[J]. *International Journal of Fatigue*, 2014, 62: 180-193.
- [42] TOME C, CANOVA G R, KOCKS U F, et al. The relation between macroscopic and microscopic strain hardening in FCC polycrystals[J]. *Acta Metallurgica*, 1984, 32(10): 1637-1653.
- [43] WANG H, WU P D, TOMÉ C N, et al. Study of lattice strains in magnesium alloy AZ31 based on a large strain elastic-viscoplastic self-consistent polycrystal model[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2012, 49(15/16): 2155-2167.
- [44] LIU P W, WANG Z, XIAO Y H, et al. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials[J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 128: 102670.
- [45] 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(9): 81-86.
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(9): 81-86.
- [46] CAILLETAUD G. A micromechanical approach to inelastic behaviour of metals[J]. *International Journal of Plasticity*, 1992, 8(1): 55-73.
- [47] HORSTEMEYER M F, MCDOWELL D L. Modeling effects of dislocation substructure in polycrystal elastoviscoplasticity[J]. *Mechanics of Materials*, 1998, 27(3): 145-163.
- [48] FREDERICK C O, ARMSTRONG P J. A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect[J]. *Materials at High Temperatures*, 2007, 24(1): 1-26.
- [49] MÉRIC L, POUBANNE P, CAILLETAUD G. Single crystal modeling for structural calculations: Part 1—model presentation[J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 1991, 113(1): 162-170.
- [50] HENNESSEY C, CASTELLUCCIO G M, MCDOWELL D L. Sensitivity of polycrystal plasticity to slip system kinematic hardening laws for Al 7075-T6 [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2017, 687: 241-248.
- [51] OHNO N, WANG J D. Kinematic hardening rules with critical state of dynamic recovery, part I: Formulation and basic features for ratchetting behavior[J]. *International Journal of Plasticity*, 1993, 9(3): 375-390.
- [52] PHILIPPE M J, BOUZY E, FUNDENBERGER J J. Textures and anisotropy of titanium alloys[J]. *Materials Science Forum*, 1998, 273/274/275: 511-522.
- [53] MAYEUR J R, MCDOWELL D L. A three-dimensional crystal plasticity model for duplex Ti-6Al-4V [J]. *International Journal of Plasticity*, 2007, 23(9): 1457-1485.
- [54] KAPOOR K, YOO Y S J, BOOK T A, et al. Incorporating grain-level residual stresses and validating a crystal plasticity model of a two-phase Ti-6Al-4V al-

- loy produced via additive manufacturing[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 121: 447-462.
- [55] OZTURK D, SHAHBA A, GHOSH S. Crystal plasticity FE study of the effect of thermo-mechanical loading on fatigue crack nucleation in titanium alloys[J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2016, 39(6): 752-769.
- [56] OROWAN E. Zur Kristallplastizität III [J]. *Zeitschrift für Physik*, 1934, 89(9): 634-659.
- [57] KOCKS U F, ARGON A S, ASHBY M F. *Thermodynamics and kinetics of slip* [M]. [S.l.]: Pergamon Press, 1975.
- [58] KOCKS U F, MECKING H. Physics and phenomenology of strain hardening: The FCC case[J]. *Progress in Materials Science*, 2003, 48(3): 171-273.
- [59] 章海明, 徐帅, 李倩, 等. 晶体塑性理论及模拟研究进展[J]. *塑性工程学报*, 2020, 27(5): 12-32.
ZHANG Haiming, XU Shuai, LI Qian, et al. Progress of crystal plasticity theory and simulations[J]. *Journal of Plasticity Engineering*, 2020, 27(5): 12-32.
- [60] FAN R, WU Y, CHEN M, et al. Prediction of anisotropic deformation behavior of TA32 titanium alloy sheet during hot tension by crystal plasticity finite element model[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2022, 843: 143137.
- [61] SHAHBA A, GHOSH S. Crystal plasticity FE modeling of Ti alloys for a range of strain-rates. Part I : A unified constitutive model and flow rule[J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 87: 48-68.
- [62] MA A, ROTERS F. A constitutive model for FCC single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals[J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(12): 3603-3612.
- [63] MA A, ROTERS F, RAABE D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations[J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(8): 2169-2179.
- [64] BEYERLEIN I J, TOMÉ C N. A dislocation-based constitutive law for pure Zr including temperature effects[J]. *International Journal of Plasticity*, 2008, 24(5): 867-895.
- [65] ARDELJAN M, BEYERLEIN I J, KNEZEVIC M. A dislocation density based crystal plasticity finite element model: Application to a two-phase polycrystalline HCP/BCC composites[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 66(1): 16-31.
- [66] CHUAN W, HE Y, WEI L H. Modeling of discontinuous dynamic recrystallization of a near- α titanium alloy IMI834 during isothermal hot compression by combining a cellular automaton model with a crystal plasticity finite element method[J]. *Computational Materials Science*, 2013, 79: 944-959.
- [67] ZHAO J, LV L, WANG K, et al. Effects of strain state and slip mode on the texture evolution of a near- α TA15 titanium alloy during hot deformation based on crystal plasticity method[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 38: 125-134.
- [68] LU X, ZHANG X, SHI M, et al. Dislocation mechanism based size-dependent crystal plasticity modeling and simulation of gradient nano-grained copper[J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, 113: 52-73.
- [69] ZHAO J, LV L, LIU G, et al. Analysis of deformation inhomogeneity and slip mode of TA15 titanium alloy sheets during the hot tensile process based on crystal plasticity model[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2017, 707: 30-39.
- [70] MECKING H, KOCKS U F. Kinetics of flow and strain-hardening[J]. *Acta Metallurgica*, 1981, 29(11): 1865-1875.
- [71] DUNNE F P E, RUGG D, WALKER A. Length-scale-dependent, elastically anisotropic, physically-based hcp crystal plasticity: Application to cold-dwell fatigue in Ti alloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 2007, 23(6): 1061-1083.
- [72] BUSSO E P, MEISSONNIER F T, O'DOWD N P. Gradient-dependent deformation of two-phase single crystals[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(11): 2333-2361.
- [73] MUTH A, JOHN R, PILCHAK A, et al. Analysis of fatigue indicator parameters for Ti-6Al-4V microstructures using extreme value statistics in the HCF regime[J]. *International Journal of Fatigue*, 2021, 145: 106096.
- [74] PRZYBYLA C, PRASANNAVENKATESAN R, SALAJEGHEH N, et al. Microstructure-sensitive modeling of high cycle fatigue[J]. *International Journal of Fatigue*, 2010, 32(3): 512-525.
- [75] STOPKA K S, YAGHOUBI M, ALLISON J E, et al. Effects of boundary conditions on microstructure-sensitive fatigue crystal plasticity analysis[J]. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 2021, 10(3): 393-412.
- [76] STOPKA K S, MCDOWELL D L. Microstructure-sensitive computational estimates of driving forces for surface versus subsurface fatigue crack formation in Duplex Ti-6Al-4V and Al 7075-T6[J]. *JOM*, 2020, 72(1): 28-38.
- [77] SEGURADO J, LEBENSOHN R A, LLORCA J. Computational homogenization of polycrystals[J]. *Advances in Applied Mechanics*, 2018, 51: 1-114.
- [78] GROEBER M A, JACKSON M A. DREAM.3D: A

- digital representation environment for the analysis of microstructure in 3D[J]. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 2014, 3(1): 56-72.
- [79] EDREES S A, RAFAA A, FATHY I, et al. NEPER: A multiple strategy wheat expert system[J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2003, 40(1/2/3): 27-43.
- [80] CRUZADO A, LLORCA J, SEGURADO J. Modeling cyclic deformation of inconel 718 superalloy by means of crystal plasticity and computational homogenization[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2017, 122/123: 148-161.
- [81] GHOSH S, CHAKRABORTY P. Microstructure and load sensitive fatigue crack nucleation in Ti-6242 using accelerated crystal plasticity FEM simulations[J]. *International Journal of Fatigue*, 2013, 48: 231-246.
- [82] MANONUKUL A, DUNNE F P E. High and low cycle fatigue crack initiation using polycrystal plasticity[J]. *Proceedings of the Royal Society of London, Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2004, 460(2047): 1881-1903.
- [83] SHENOY M, ZHANG J, MCDOWELL D L. Estimating fatigue sensitivity to polycrystalline Ni-base superalloy microstructures using a computational approach[J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2007, 30(10): 889-904.
- [84] HOCHHALTER J D, LITTLEWOOD D J, CHRIST R J, et al. A geometric approach to modeling microstructurally small fatigue crack formation: II. Physically based modeling of microstructure-dependent slip localization and actuation of the crack nucleation mechanism in AA 7075-T651[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, 18: 045004.
- [85] LIU W, HUANG J, LIU J, et al. Experimental and crystal plasticity modelling study on the crack initiation in micro-texture regions of Ti-6Al-4V during high cycle fatigue tests[J]. *International Journal of Fatigue*, 2021, 148: 106203.
- [86] FATEMI A, SOCIE D F. A critical plane approach to multiaxial fatigue damage including out-of-phase loading[J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 1988, 11(3): 149-165.
- [87] FATEMI A, SOCIE D F. *Multiaxial fatigue: Damage mechanisms and life predictions*[C]//*Proceedings of Advances in Fatigue Science and Technology*. Dordrecht: Springer Netherlands, 1989: 877-890.
- [88] ZHANG M, HAN F, TANG B, et al. Effects of microstructure on high cycle fatigue properties of dual-phase Ti alloy: Combined nonlocal CPFE simulations and extreme value statistics[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2020, 9(3): 5991-6000.
- [89] SMITH B D, SHIH D S, MCDOWELL D L. Fatigue hot spot simulation for two Widmanstätten titanium microstructures[J]. *International Journal of Fatigue*, 2016, 92: 116-129.
- [90] CHARKALUK E, BIGNONNET A, CONSTANTINESCU A, et al. Fatigue design of structures under thermomechanical loadings[J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2002, 25(12): 1199-1206.
- [91] WAN V V C, MACLACHLAN D W, DUNNE F P E. A stored energy criterion for fatigue crack nucleation in polycrystals[J]. *International Journal of Fatigue*, 2014, 68: 90-102.
- [92] STOPKA K S, MCDOWELL D L. Microstructure-sensitive computational multiaxial fatigue of Al 7075-T6 and duplex Ti-6Al-4V[J]. *International Journal of Fatigue*, 2020, 133: 105460.
- [93] ROVINELLI A, GUILHEM Y, PROUDHON H, et al. Assessing reliability of fatigue indicator parameters for small crack growth via a probabilistic framework[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2017, 25: 045010.
- [94] MCDOWELL D L, DUNNE F P E. Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation[J]. *International Journal of Fatigue*, 2010, 32(9): 1521-1542.
- [95] STOPKA K S, GU T, MCDOWELL D L. Effects of algorithmic simulation parameters on the prediction of extreme value fatigue indicator parameters in duplex Ti-6Al-4V[J]. *International Journal of Fatigue*, 2020, 141: 105865.
- [96] MOORE J A, FRANKEL D, PRASANNAVENKATESAN R, et al. A crystal plasticity-based study of the relationship between microstructure and ultra-high-cycle fatigue life in nickel titanium alloys[J]. *International Journal of Fatigue*, 2016, 91: 183-194.
- [97] SANGID M D. The physics of fatigue crack initiation[J]. *International Journal of Fatigue*, 2013, 57: 58-72.
- [98] YAGHOUBI M, STOPKA K S, LAKSHMANAN A, et al. PRISMS-fatigue computational framework for fatigue analysis in polycrystalline metals and alloys[J]. *Computational Materials*, 2021(1): 349-360.
- [99] 易敏, 常珂, 梁晨光, 等. 增材制造微结构演化及疲劳分散性计算[J]. *力学学报*, 2021, 53(12): 3265-3275.
- YI Min, CHANG Ke, LIANG Chenguang, et al. Computational study of evolution and fatigue dispersivity of microstructures by additive manufacturing[J].

- Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2021, 53(12): 3265-3275.
- [100] LI Y, ZHAN M, JIANG X, et al. Low-cycle fatigue behavior and life prediction of TA15 titanium alloy by crystal plasticity-based modelling[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 23: 954-966.
- [101] ZHANG P, ZHANG L, BAXEVANAKIS K P, et al. Modelling short crack propagation in a single crystal nickel-based superalloy using crystal plasticity and XFEM[J]. International Journal of Fatigue, 2020, 136: 105594.
- [102] PRASTITI N G, XU Y, BALINT D S, et al. Discrete dislocation, crystal plasticity and experimental studies of fatigue crack nucleation in single-crystal nickel[J]. International Journal of Plasticity, 2020, 126: 102615.
- [103] MCDOWELL D L, GALL K, HORSTEMEYER M F, et al. Microstructure-based fatigue modeling of cast A356-T6 alloy[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2003, 70(1): 49-80.
- [104] PRZYBYLA C P, MUSINSKI W D, CASTELLUCCIO G M, et al. Microstructure-sensitive HCF and VHCF simulations[J]. International Journal of Fatigue, 2013, 57: 9-27.
- [105] ANAHID M, SAMAL M K, GHOSH S. Dwell fatigue crack nucleation model based on crystal plasticity finite element simulations of polycrystalline titanium alloys[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2011, 59(10): 2157-2176.
- [106] KIRANE K, GHOSH S. A cold dwell fatigue crack nucleation criterion for polycrystalline Ti-6242 using grain-level crystal plasticity FE model[J]. International Journal of Fatigue, 2008, 30(12): 2127-2139.
- [107] TANAKA K, MURA T. A dislocation model for fatigue crack initiation[J]. Journal of Applied Mechanics, 1981, 48(1): 97-103.
- [108] KRAMBERGER J, JEZERNIK N, GÖNCZ P, et al. Extension of the Tanaka-Mura model for fatigue crack initiation in thermally cut martensitic steels[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2010, 77(11): 2040-2050.
- [109] WU X. A fatigue crack nucleation model for anisotropic materials[J]. Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures, 2019, 42(1): 387-393.
- [110] CHAN K S. A microstructure-based fatigue-crack-initiation model[J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2003, 34(1): 43-58.
- [111] LIU X, LU S. A micro-crack initiation life simulation method by improving the Tanaka-Mura's model of slip behavior[J]. International Journal of Fatigue, 2021, 145: 106108.
- [112] FINE M E, BHAT S P. A model of fatigue crack nucleation in single crystal iron and copper[J]. Materials Science and Engineering: A, 2007, 468/469/470: 64-69.
- [113] LI L, SHEN L, PROUST G. Fatigue crack initiation life prediction for aluminium alloy 7075 using crystal plasticity finite element simulations[J]. Mechanics of Materials, 2015, 81: 84-93.

(编辑: 胥橙庭)