

镁合金晶体塑性有限元研究进展



李强^{1,2,*}, 谢东柏^{1,2}, 郭辉^{1,2}, 董海荣^{1,2}, 张晓亮², 赵德彪^{1,2}, 初连章²

¹潍坊市轻质材料先进成型与制备技术重点实验室, 山东寿光 262700

²潍坊科技学院智能制造学院, 山东寿光 262700

摘要: 近年来,镁合金由于其轻质、环境友好和节能优点而吸引了越来越多的企业与研究机构的兴趣。塑性是金属成形的一种重要方式,由于镁合金为密排六方晶体结构,在室温下仅有基面滑移,其塑性性能较差。晶体塑性有限元是探究材料宏/微观塑性变形机理的有效方法,利用这种方法有助于掌握介观层面上的变形机理,并合理确定塑性成形工艺。本文首先评述了近年来国内外晶体塑性有限元在镁合金中的研究进展,包括镁合金塑性变形理论研究进展,其主要的变形模型和硬化模型;其次评述镁合金晶体塑性有限元的最新应用,包括滑移与孪晶在变形中的作用、晶体塑性有限元与实验对比研究、孪晶形成和分布与局部应力关系、晶体塑性有限元多尺度研究等,最后评述了镁合金晶体塑性有限元研究以及存在的问题,相应的提出了未来镁合金晶体塑性有限元研究的发展方向。

关键词: 镁合金; 晶体塑性有限元; 密排六方结构; 变形孪生

DOI: [10.57237/j.mater.2022.01.001](https://doi.org/10.57237/j.mater.2022.01.001)

Research Progress of Mg Alloy Crystal Plastic Finite Element Method

Qiang Li^{1,2,*}, Dongbai Xie^{1,2}, Hui Guo^{1,2}, Hairong Dong^{1,2}, Xiaoliang Zhang², Debiao Zhao^{1,2}, Lianzhang Chu²

¹Weifang Key Lab of Light Material Advanced Manufacturing and Forming Technology, Shouguang 262700, China

²School of Intelligent Manufacturing, Weifang University of Science and Technology, Shouguang 262700, China

Abstract: Recently Mg alloy has been aroused great interests from institutes and industries for its advantages of lightweight, environmental friendly and energy saving. Plastic deforming is an important way for material forming. However, due to its hexagonal closed packed crystal structure, there is only basal slip to be activated under the room temperature, it is very hard to forming by plastic method. Crystal Plastic finite element method is an effective method to study mechanism of deformation from micro-scale to macro-scale, which is helpful to understand the mechanism of plastic deformation in mesoscale and design reasonable plastic forming technology by this method. In this article, firstly, the research progress of crystal plastic finite element method of Mg alloy was reviewed, including the theoretical mechanism of plastic deformation that could be divided into two parts, one was deforming model, and the other was hardening model. Secondly, the latest applications of crystal plastic finite element method were presented, which included the effects of slip and twin on plastic deformation, comparison between crystal plastic simulation and experimental verifying, the relationship between the local stress distribution and the twin forming and distribution, multiscale researching on crystal plastic finite element method, and then the problems in crystal plastic finite element method for Mg alloy were shown. Finally, the future research directions of crystal plastic finite element method for Mg alloy were pointed out.

*通信作者: 李强, q.li@wfust.edu.cn

Keywords: Mg Alloy; Crystal Plastic Finite Element Method; Hexagonal Closed Packed Structure; Deforming Twinning

1 引言

塑性是材料的一个重要性能指标,它反映在外力作用下,材料的永久变形能力。镁合金是最轻的金属结构材料[1],其密度仅为 1800kg/m^3 [2],是铝的 $2/3$,铁的 $1/4$ 。同时镁合金具有较高的比强度、弹性模量,导热性好等优点,广泛应用于航空航天、轨道交通、电子工业[3, 4]。但由于镁合金为密排六方(HCP),其晶体结构对称性低,室温下仅有两个滑移系[5],导致其塑性变形较面心立方和体心立方结构材料困难。

晶体塑性有限元是利用晶体塑性理论结合有限元方法来研究多晶体材料在塑性变形过程中介观层面的变形机理,因此利用晶体塑性有限元方法研究镁合金的塑性变形将有助于从组织层面理解镁合金的力与组织相互作用机理,为合理制定镁合金塑性成形工艺提供了理论指导,进而为拓展镁合金在固态变形应用领域和实现国家节能减排战略具有重要理论与社会经济价值。

论文主体内容包括四个部分,第1部分介绍背景与意义,第2部分评述镁合金晶体塑性有限元的理论和应用研究进展,第3部分评述了镁合金晶体塑性有限元研究存在的问题,第4部分结论,指出镁合金晶体塑性有限元研究未来发展方向。

2 镁合金晶体塑性有限元模型的发展

晶体塑性理论最早追溯到1938年Taylor的组织塑性[6],随后1985年Needleman提出的速率相关的组织和硬化模型发展[7],其理论和模型基于晶体连续假设,模型对宏观的应力/应变和组织演变很有效,但缺乏对微观变形历史的跟踪[8]。随着有限元技术的发展,它不仅可以数值逼近来近似求解出复杂结构的应力/应变场,而且基于晶体塑性理论的有限元将变形体的组织和与组织对应的边界进行体积空间离散,因此可以更好的预测微观局部区域的变形历史。

在过去的几十年里,晶体塑性有限元广泛用于三个方面:1)研究变形过程中的组织演变[9-11];2)预测在微观局部区域内应力/应变场[12-14];3)根据连续性模型计算变形过程中和变形后微观区域的机械性能

[15-18]。目前晶体塑性有限元方法是基于相在多晶粒中的聚集是根据晶粒的取向,晶粒则由相代替,相同取向的晶粒则属于同一机械性能相这一假设[19]。

在常用金属中,在面心立方和体心立方材料的晶体塑性有限元的应用中,基于位错滑移产生的变形为主导的晶体塑性变形理论取得了巨大的成功[20, 21],不仅可以模拟晶体的弹塑性变形[22],晶粒边界形成机制[23],组织在塑性变形的演变[24],塑性变形与相变[25],相变马氏体相变[26],多相复合材料变形[27],静/动态再结晶[9, 28, 29],加工硬化[15, 17],变形制耳[30]等领域。而对于密排六方晶格材料而言,孪生对宏观变形的作用已经不可忽视,根据Von-Mises准则,任意塑性变形要求至少五个独立的塑性变形自由度,而基面滑移只能提供两个塑性变形的自由度,孪生变形则贡献了其余的自由度[14]。因此相对于面心立方和体心立方晶格,密排六方结构中的晶体塑性有限元的研究相对更复杂。

2.1 镁合金晶体塑性理论

在镁合金的变形模式中有基面滑移 $\langle a \rangle$ 、棱面滑移 $\langle a \rangle$ 、锥面滑移 $\langle c+a \rangle$ 和拉伸孪生[31]。在室温条件下,基面滑移 $\langle a \rangle$ 启动的临界分切应力远远小于非基面滑移系 $\langle a \rangle \langle c+a \rangle$ 的启动应力远远大于基面滑移系[32]。镁合金室温下的滑移可见图1。

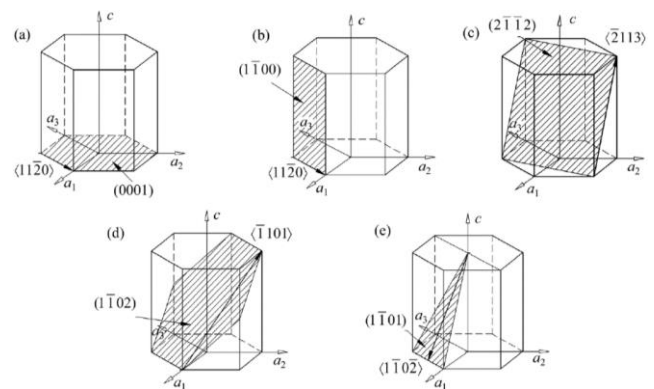


图1 镁合金的滑移与孪生系[33]

1) 变形模型

在晶体塑性有限元模型中,变形梯度可以表示为[34]:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^P \quad (1)$$

其中 \mathbf{F}^* 为弹性和晶格扭转的变形梯度, \mathbf{F}^P 为塑形变形梯度。

变形速度梯度可以分解为弹性部分和塑性部分 [32]:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^P \quad (2)$$

其中为 \mathbf{L}^e 弹性速度梯度, \mathbf{L}^P 为塑性速度梯度。由于镁合金中存在孪生的作用, 其塑性速度梯度可以表示为 [31]:

$$\mathbf{L}^P = \dot{\mathbf{F}}^P \mathbf{F}^{P-1} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{twin}}} \dot{\gamma}_{\text{tw}}^{\beta} \mathbf{s}_{0,\text{tw}}^{\beta} + \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{s}_{0,\text{slip}}^{\alpha} \quad (3)$$

其中 $\dot{\gamma}_{\text{tw}}^{\beta}$ 为在孪生系 β 上的剪切速率, N_{twin} 为晶体内的总孪生数, γ_{α} 为在滑移系 α 上的滑移速率, N_{slip} 为总的滑移系数, \mathbf{s} 为斯密德 (Schmid) 张量, 在第 α 个滑移系上的斯密德张量可以表示为:

$$\mathbf{s}_{0,\text{slip}}^{\alpha} = \mathbf{m}_{0,\text{slip}}^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_{0,\text{slip}}^{\alpha} \quad (4)$$

其中 $\mathbf{m}_{0,\text{slip}}^{\alpha}$ 为滑移方向, $\mathbf{n}_{0,\text{slip}}^{\alpha}$ 为滑移面法线方向。在第 β 孪生系上的斯密德张量为:

$$\mathbf{s}_{0,\text{slip}}^{\beta} = \mathbf{m}_{0,\text{tw}}^{\beta} \otimes \mathbf{n}_{0,\text{tw}}^{\beta} \quad (5)$$

其中 $\mathbf{m}_{0,\text{tw}}^{\beta}$ 为孪生系 β 的剪切方向, 为孪生面 β 的法向方向。

在密排六方晶格中滑移系 α 上的滑移速率 $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 可以表示为 [31]:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0^{\alpha} \left| \frac{\tau^{\alpha} - s_0^{\alpha}}{s_0^{\alpha}} \right|^{\frac{1}{m}} \text{sign}(\tau^{\alpha} - s_0^{\alpha}) \quad (6)$$

其中 $\dot{\gamma}_0^{\alpha}$ 为对于 α 滑移系的参考滑移速率, m 为应变速率相关的指数常数, τ^{α} 为 α 滑移系上的分切应力, 它可以表示为: $\tau^{\alpha} = \mathbf{F}^e \mathbf{T} \mathbf{F}^e \mathbf{S}: \mathbf{s}_0^{\alpha}$ 。

2) 硬化模型

由于变形速率导致材料的加工硬化可以表示为 [35]:

$$\dot{\mathbf{g}}^{\alpha} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{\beta} \quad (7)$$

其中 $h_{\alpha\beta}$ 为硬化系数, 可以表示为:

$$h_{\alpha\beta} = \begin{cases} h(\gamma_{\alpha}) & (\alpha = \beta) \\ q_{AB} h(\gamma_{\alpha}) & (\alpha \neq \beta) \end{cases} \quad (8)$$

其中 q_{AB} 为潜硬化项, 下标 A、B 对应的是滑移系 α 和

孪生系 β 。

对于镁合金来讲, 在基面滑移时:

$$h(\gamma_{\alpha}) = h_0 \quad (9)$$

而对于棱面滑移和锥面滑移

$$h(\gamma_{\alpha}) = h_0 \left[1 - \frac{\tau_0}{\tau_{\infty}} \right] \exp \left[-\frac{h_0 \gamma_{\alpha}}{\tau_{\infty}} \right] \quad (10)$$

对于每个滑移系 α , 其滑动阻力 τ_c^{α} 可以由下式表达 [36]:

$$\tau_c^{\alpha} = \tau_0^{\alpha} + \tau_{0,HP}^{\alpha} + \tau_{for}^{\alpha} + \tau_{sub}^{\alpha} \quad (11)$$

τ_0^{α} 为摩擦应力, 它可以表示为:

$$\tau_0^{\alpha}(T) = A^{\alpha} \exp \left(-\frac{T}{B^{\alpha}} \right) \quad (12)$$

其中 A、B 为材料相关系数, T 为温度。

$\tau_{0,HP}^{\alpha}$ 为阻碍作用项, 与晶界由平均晶粒尺寸 d_g 相关, 根据 Hall-Petch 公式, 它可以表示为:

$$\tau_{0,HP}^{\alpha} = \mu H^{\alpha} \sqrt{\frac{b^{\alpha}}{d_g}} \quad (13)$$

其中 b 为柏氏矢量, μ 为有效剪切模量 (effective shear modulus), H^{α} 为 Hall-Petch 参数。

τ_{for}^{α} 为位错林内部相互作用阻碍项, 源于位错林的随机分布, 和 τ_{sub}^{α} 为位错与亚结构之间的相互作用, 它与晶界\亚晶界等有关。

$$\tau_{for}^{\alpha} = x b^{\alpha} \mu^{\alpha} \sqrt{\rho_{for}^{\alpha}} \tau_{sub}^{\alpha} = k_{sub} \mu^{\alpha} b^{\alpha} \sqrt{\rho_{sub}} \log \left(\frac{1}{b^{\alpha} \sqrt{\rho_{sub}}} \right) \quad (14)$$

位错林的密度是通过动态回复和速率的竞争结果。对于孪生系 α , 其特征阻力可以表示为 [36]:

$$\tau_c^t = \tau_0^{\beta} + \tau_{0,HP}^{\beta} + \tau_{slip}^t \quad (15)$$

其中 τ_0^{β} 为温度相关的摩擦项, 其可以表示为:

$$\tau_0^{\beta} = \tau_{prop}^{\beta} + \left(\tau_{crit}^{\beta} - \tau_{prop}^{\beta} \right) \exp \left(-\sum \frac{\rho_{for}^{\beta}}{\rho_{sat}^{\beta}} \right) \quad (16)$$

其中 τ_{crit}^{β} 和 τ_{prop}^{β} 为形核与扩展应力。

$\tau_{0,HP}^{\beta}$ 为类似 Hall-Petch 项, 其可以表示为:

$$\tau_{0,HP}^{\beta} = \frac{H_0^{\beta}}{\sqrt{d_g}} \quad (17)$$

其中

$$\tau_{slip}^t = \mu^\beta(T) \sum_s C^{\beta\alpha} b^\beta b^\alpha \rho_{for}^s \quad (18)$$

其中 μ^β 为弹性剪切模量, b^β 为柏式矢量, $C^{\beta\alpha}$ 为潜硬化矩阵, ρ_{for}^s 为位错林密度。

2.2 镁合金晶体塑性有限元的最近发展

2009 年彭颖红等人[37]建立了一个基于滑移孪生耦合的率无关晶体塑性有限元模型,在金属塑性变形

中,变形由每个晶粒内滑移面上沿滑移方向的剪切变形和孪生面上的孪生变形共同构成。计算发现在镁合金压缩变形过程中,孪生是镁合金变形和加工硬化的主要机制。

Weiqing Tang 等人[38]采用率相关的晶体塑性有限元研究了 AZ31 镁合金板材冲压过程,研究发现基面滑移对变形的贡献最大,由于低斯密德 Schmid 因子,孪生贡献最小,见图 2 所示。

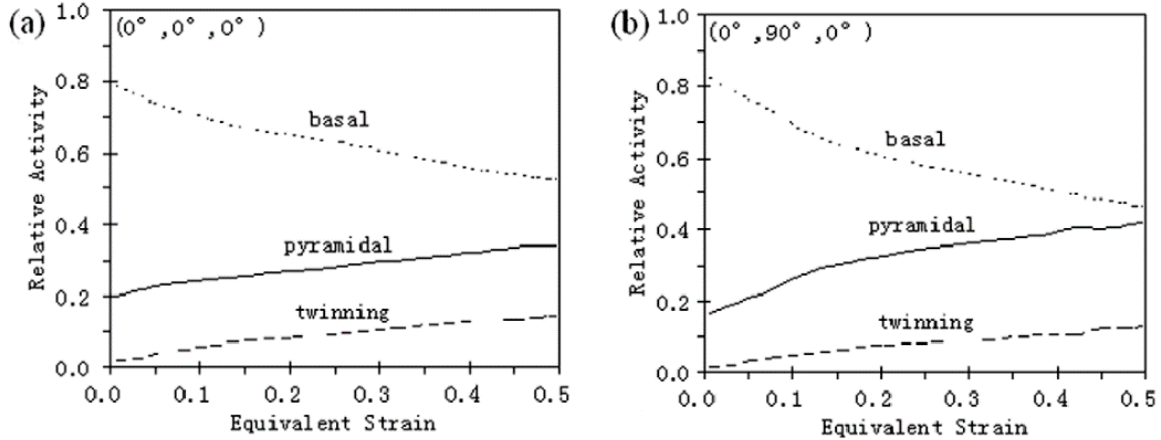


图 2 不同组织取向下滑移、锥面滑移和孪生的贡献[38]

2010 年 Hu 等人[39]和 2011 年 Heo 等人[40]晶体塑性有限元方法与相场方法结合计算密排六方晶体结构的应力诱导孪生和退孪过程,相场方法能够很好的展现变形孪生形成过程,但相场方法只能模拟几个晶粒尺度区域,无法实现宏观大尺度的计算。

2010 年 Choi 等人[32]采用孪生控制晶粒重新取向模型计算了 AZ31 镁合金的组织演变和宏观的性能变化,通过 200 °C 单向拉伸和压缩试验验证了理论计算模型,见图 2,对比结果表明组织演变、孪生体积分数和宏观力学性能严重依赖于加载条件。

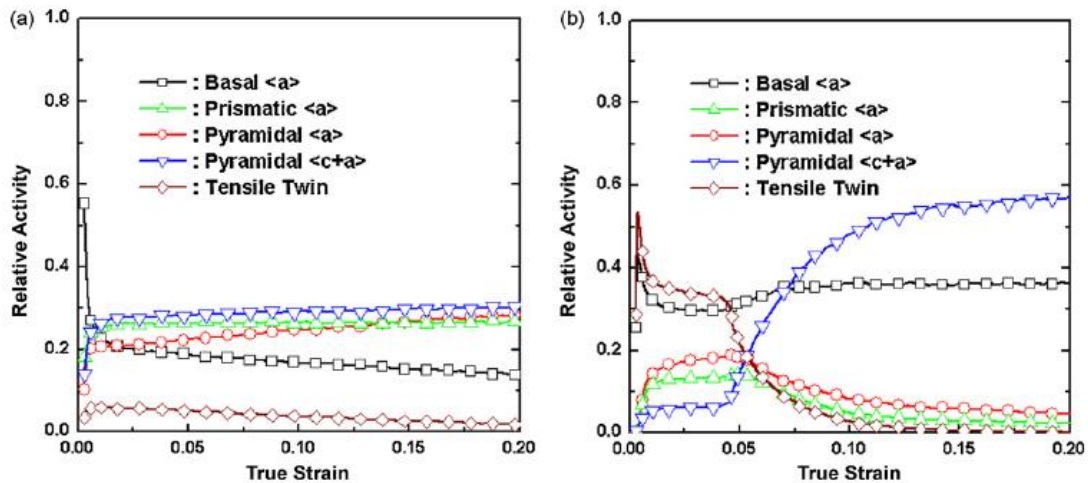


图 3 200 °C 非轴向加载 5 种变形模式的相对贡献, a)拉伸方向与轧制方向平行, b)压缩方向与轧制方向平行[32]

Choi 的模型考虑了镁合金 4 个滑移系和一个孪生系,在拉伸试样中,塑性变形开始于基面滑移<a>,随着真应变

的增加,基面滑移<a>迅速降低,棱面滑移<a>和锥面滑移系<c+a>快速增加,逐渐起到主导作用。在压缩试样中,

塑性变形起始于拉伸孪生和基面滑移<a>, 随这真应变的增加, 拉伸孪生不断下降, 锥面滑移不断增加。

2011 年 Shiyao Huang 等人[41]采用晶体塑性有限元计算了体心立方、面心立方和密排六方材料的塑性变形, 在密排六方材料选择 AZ31 镁合金非轴向压缩, 在其模型中孪生导致的晶粒再取向的阈值 F_T 可以表示为: $F_T = a + \frac{bV_E}{V_R}$, V_E 为有效孪生份数, V_R 为总积累孪生数。但其模型考虑了三个滑移系基面<a>、棱面<a>、锥面<c+a>和孪生。

2012 年 Shin 等人[42]采用了由 EBSD 组织图构建晶体塑性有限元, 其二维组织形貌和晶粒取向直接来源于 EBSD, 进而建立一个准三维组织图, 该方法能够放映出厚度层一层的相邻晶粒影响, 不是由 Voronoi 方法产生的组织, 见图 4。以此组织建立了一个分析了 AZ31 镁合金挤压的晶体塑性有限元, Shin 采用这种方法模拟了真应变为 0.05 和 0.1 的压缩过程, 发现在未发生孪生区域, 基面滑移<a>和拉伸孪生是主要的变形模式, 在孪生区显示出大量锥面滑移<c+a>, 说明孪生

导致的晶粒取向重置激活了锥面滑移<c+a>, 见图 5 所示。Shin 发现基于 Schmid 因子的分剪切应力不能预测激活孪生的最高二阶、三阶分切应力, 而这两部分在孪生产生中分别占 25%和 18.75%的贡献。

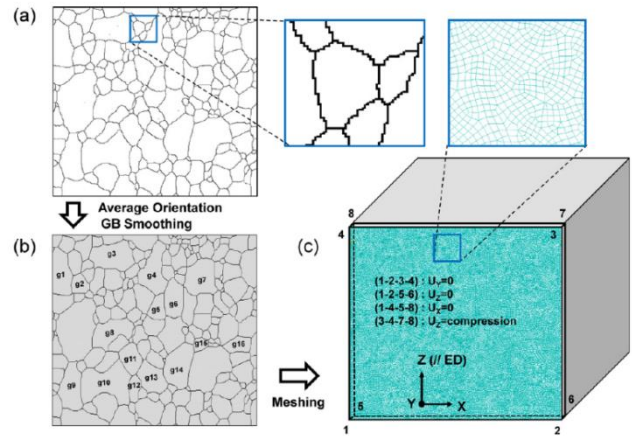


图 4 EBSD 组织图转变为有限元的预处理, a)直接将 EBSD 组织图转变为规则的有限元网格, b)对 2 维有限元网格的晶粒边界进行局部圆滑处理, c)将 2 维有限元转换为准 3 维有限元进行压缩处理[42]

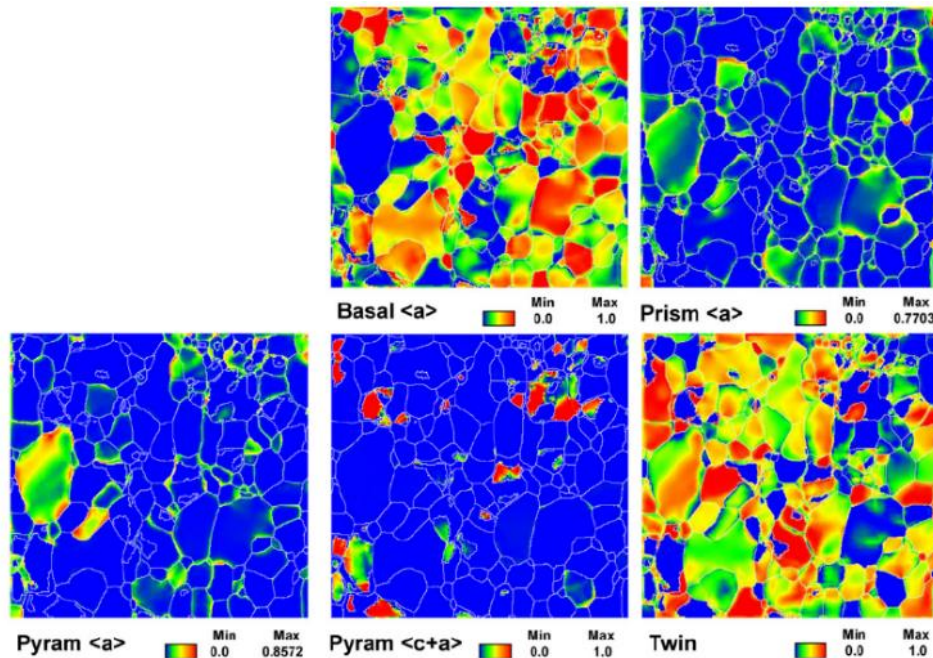


图 5 在真应变为 0.05 时, 压缩试样组织内不同变形模式的分布[42]

2013 年 Abdolvand 等人[43]研究了 HCP 材料的孪生形成, 他们采用 EBSD 获得的晶粒图导入到晶体塑性有限元中模型, 计算发现, 孪生倾向在晶粒边界处形成, 尤其是两个晶粒交界的部位, 但他们的研究也发现最高几何斯密德 (Schmid) 因子模拟计算结构与

实验测量相差较大。

2014 年唐伟琴等人[30]通过晶体塑性有限元研究了 AZ31 镁合金板料冲压过程中组织的演化及其对制耳的影响, 晶粒转动采用占主导地位的孪生系计算孪生对晶体转动的贡献, 通过计算每一步的孪生体积分

数增量, 进而对孪生体积分数增量进行叠加, 当总的孪生体积分数超过临界值时, 晶粒就发生转动, 晶粒取向重新确定。模拟研究发现, 在 AZ31 镁合金冲压初始阶段, 拉伸孪生是主要的变形机制, 拉伸孪生是由沿圆周的压应变引起, 柱面滑移也随之启动, 随着孪生的进行, 晶粒转到易滑移方向, 基面滑移和锥面滑移也开始活跃。

蓝永庭等人[33]采用晶体塑性有限元研究 AZ31 镁合金压缩变形过程, 发现宏观塑性行为取决于各滑移系与孪生系的竞争, 而拉伸孪生变形是引起基面织构的主要原因。随后在 2015 年蓝永庭等人[44]以此方法研究了 AZ31 镁合金单晶屈服行为, 发现镁合金硬化与运动相关, 具有明显各向异性。

2015 年 Abdolvant 等人[45]采用三维 X 射线同步辐射实验与晶体塑性有限元模拟对比研究 AZ31B 镁合金

变形孪生, 研究发现在母晶孪生惯习面上的法向应力与孪生面上的法向应力有些小的偏差, 而对剪切应力则没有区别。但其晶体塑性有限元模型仅仅是考虑了拉伸孪生, 没有考虑退孪生(如压缩孪生)和退孪生模式。

2016 年 Milan Ardeljan 等人[36]采用晶体塑性有限元研究了 AZ31 镁合金挤压变形过程, 建立了一个多尺度大塑性变形的应变速率和温度敏感性的晶体塑性有限元模型, 其多尺度模型如图 6 所示, 在宏观上应用有限元计算出均一的有限元单元, 在介观尺度上应用 Taylor 模型结合孪生模型处理每个晶粒内部孪生变量, 其中采用了先进的复合孪生模型, 利用该模型研究了 AZ31 镁合金温挤压过程, 应变速率从 10^{-4}s^{-1} - 3000s^{-1} , 温度从 77K 到 423K。通过比对模拟结果与实验验证, 发现模型吻合良好。

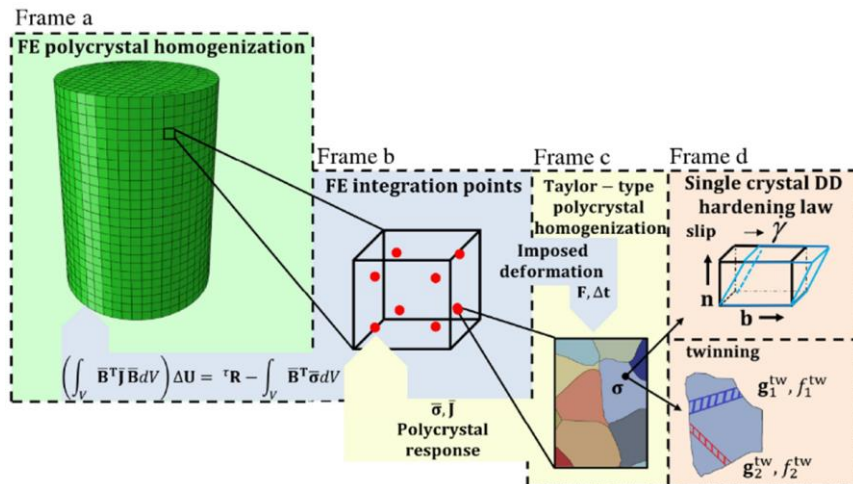


图 6 单晶到多晶的宏观多尺度的多晶体晶体塑性有限元模型框架[36]

2016 年 Yuichi Tadano 等人[35]在晶体塑性有限元模拟纯镁塑性变形过程中, 引入了一个孪生变形体积分数 ϕ , 当 $\phi=0$ 时为没有变形孪生, $\phi=1$ 时为整个区域均为变形孪生区, 而当 $\phi \in (0,1)$ 时, 则为部分孪生区, 如图 7 所示。在其模型中, 纯镁的参数由实验测定,

并导入到模型中, 发现当孪生分数小于 30%, 其与 Van Houtte 模型预测基本一致, 而当孪生分数超过 30% 时, 该模型较 Van Houtte 模型更准确, 因为该模型没有相对增加流变应力和变形孪生活度。

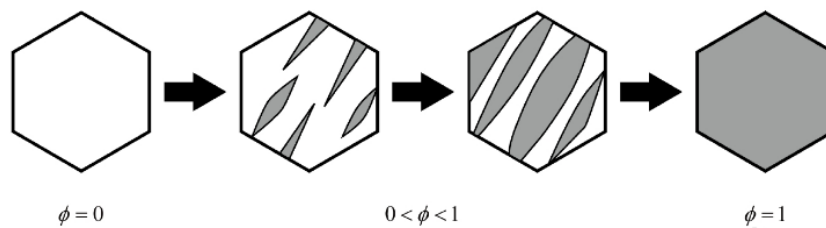


图 7 孪生体积分数变化示意图[35]

2016年杨冲等人[46]研究了AZ31镁合金板材各向异性,其采用了率无关模型,计算与实验对比发现弹性阶段应力应变曲线基本一致,塑性阶段表现出强化效果,轧制方向屈服强度小于横向屈服强度。

2017年Ardejan等人[47]用晶体塑性有限元研究AZ31镁合金中位错密度与孪生相互作用对孪生长大

的影响,建立了一个孪生增厚模型,见图8所示。研究发现在孪生区由于位错包含的孪生使得滑移的激活增强,随着孪生区存储位错速率,孪生片层增厚速率下降,单层、多层孪生片层的形成受孪生区的存储位错影响。

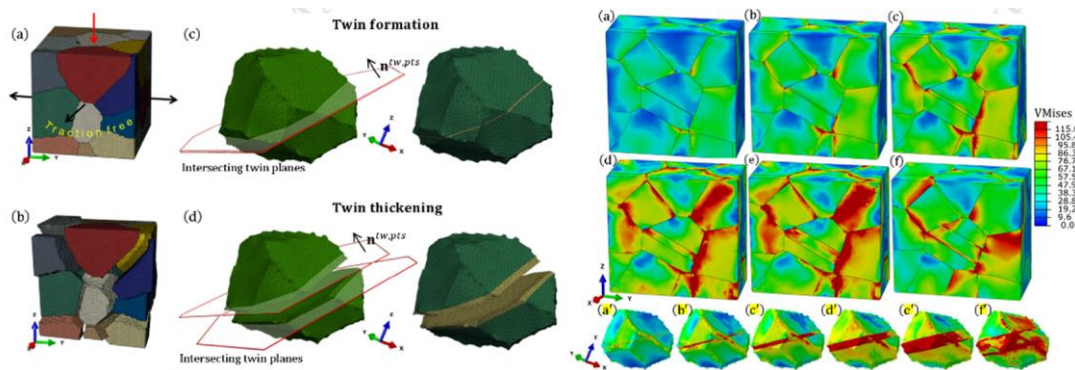


图8 孪生增厚模型与其应用的应力分布模拟[47]

2017年蓝永庭[44]等人采用晶体塑性有限元方法研究了AZ31镁合金单晶屈服过程,模拟预测的屈服形状与实验结果吻合良好,平面应变时屈服应力向上部分主要是滑移变形机制,其他方向主要是孪生变形机制。

2017年Jiahao Cheng和Somnath Ghosh[31]研究了多晶体镁合金孪生的演化,在晶体有限元模型中考虑了孪生的形核、扩展,复杂的长大,见图9示意,其

中孪生形核模型是基于无柄位错进入稳定的孪生环,扩展模型假设孪生面的原子剪切和拖曳减少了热激活能阻碍。为了提高运行效率,模型开发了一个多时间尺度的亚循环算法,可以计算出每个晶粒由于孪生引起的取向演变,模型采用纯镁的计算与实验对比,发现模拟计算的应力应变和局部应变区的孪生形成与实验观测吻合良好。

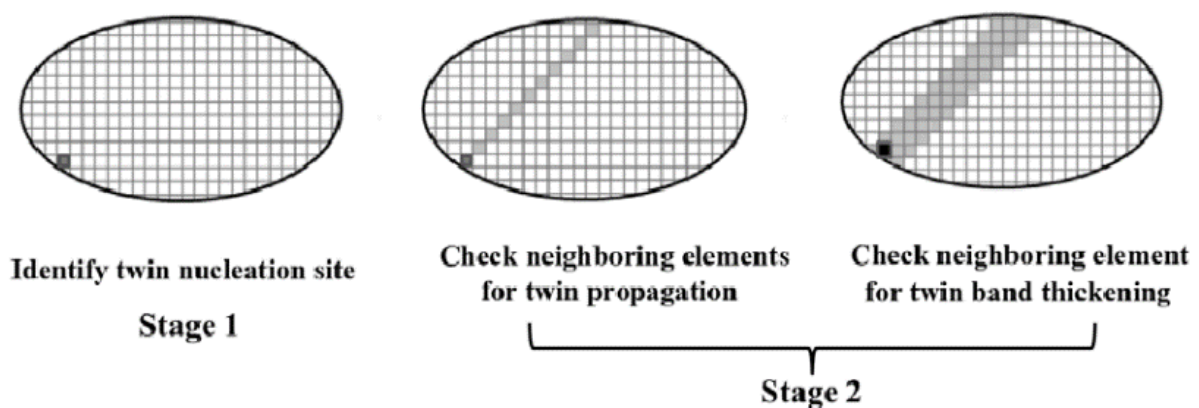


图9 晶体塑性有限元中孪生的形核模型[31]

2018年Jiahao Cheng等人[48]采用了新的晶体塑性有限元方法研究了AZ31镁合金,利用ESBD统计出晶体形貌特征参数带入到有限元模型中,模型可以反映出AZ31镁合金的不同变形机制和孪生相关局部现象,通过应力应变的模拟结果与实验对比,发现AZ31镁合金在三个方向上均吻合良好,见图10。

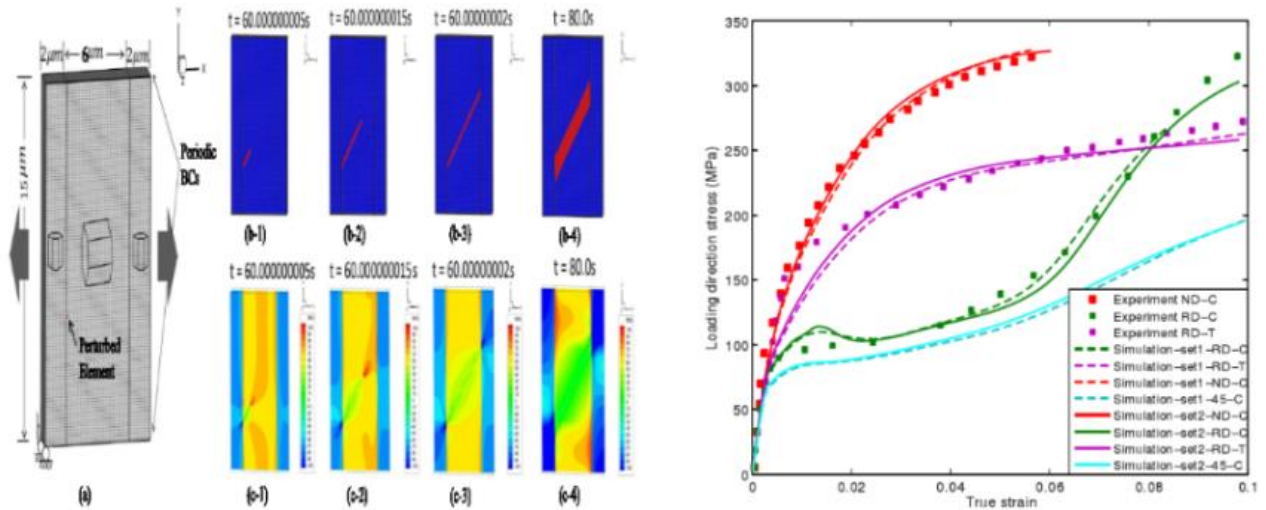


图 10 晶体塑性有限元模型模拟孪生形成和应力应变曲线的模拟结果与实验对比[48]

2019 年 Rongxin Zhou 等人[49]利用晶体塑性有限元模型研究 AM30 镁合金挤压, 模型研究了不同加载情况下组织和晶粒尺寸对 AM30 镁合金的屈服应力和应变硬化行为影响, 发现晶粒细化和初始组织显著影响 AM30 镁合金的力学性能, 变形孪生是控制非对称拉伸压缩的关键因素, 由此。

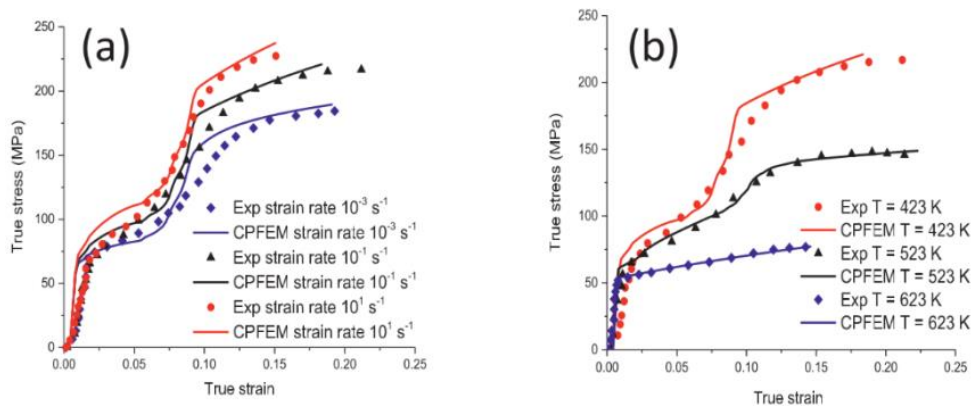


图 11 不同应变速率和温度下的真应力应变曲线的模拟计算与实验对比[49]

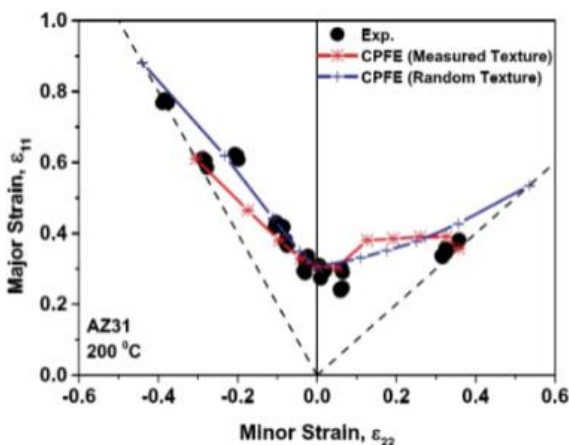


图 12 AZ31 镁合金主应变和最小应变的模拟与实验对比[50]

2019 年 Hyuk Jong Bong 等人[50]采用率相关的晶体塑性有限元模型与 MK 模型相结合预测了 AZ31、ZE10 镁合金的变形极限图, 其中晶体塑性有限元中组织分别采用实测组织和随机生成组织, 发现随机产生的组织的变形极限图与实验测试结果吻合非常良好, 见图 12, 而实测组织的有限元模型与实验测定的结果有少许偏差。

2020 年 Li Hang 等人[51]在用晶体塑性有限元研究单轴震动 AZ31 镁合金中考虑了位错滑移、孪生和退孪机理。在模型中, 位错滑移发生在在母晶和孪生区的基面、棱面和锥面滑移系, 孪生发生在孪生系, 退孪则是孪生的逆过程。变形过程中线性滑移硬化和孪晶硬化被采用, 同时采用了一个复杂的 β 比例准则来

获得多晶体聚集体来处理单个晶粒和多晶粒问题，模型与实验进行了不同应力水平的对比，结果吻合良好。

Hongjia Zhang 等人[52]通过晶体塑性有限元研究 AZ31B 镁合金压缩过程多尺度的孪生-退孪生机制，并与同步辐射原位 X 射线衍射分析和原位电子背散射衍射分析进行对比进行验证。在其应力计算模型中，应力分为三类，宏观应力、晶粒间应力和晶粒内应力三

部分，而总的应力等于这三部分叠加。采用 XRD 同步分析和原位 EBSD 观察分析不仅验证了宏观的应力应变曲线，而且验证晶粒旋转对晶粒间和晶粒内的应力分布影响，见图 13 所示。该晶体塑性有限元模型可以从晶粒内部到宏观尺度的多尺度计算材料组织与力学性能，而且能够从机理上揭示宏观应力应变曲线的变化机理，退孪生主要发生在图 13 中 DEF 阶段。

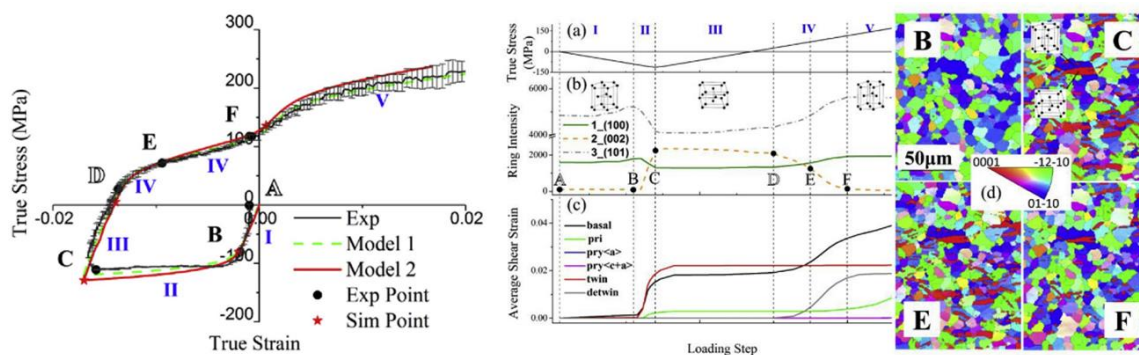


图 13 AZ31 镁合金压缩过程宏观应力应变曲线和应力对应的微观组织观察验证[52]

2020 年 Jalili M 等人[53]用晶体塑性有限元耦合 3D 研究了 ZK60 镁合金循环塑性变形，其模型包含了位错滑移、孪生和退孪生模式，计算了 277 个晶粒，平均每个晶粒有 97 个单元。模拟发现在一定条件下，非基面滑移和孪生组织可作为长程流动软化区，该工作有助于准确评价其疲劳强度。

压缩过程，而对复杂形状镁合金塑性变形所产生的复杂应力情况下的晶体塑性有限元应用较少；

4) 由于位错和滑移所导致镁合金微观缺陷生成也是当前晶体塑性有限元研究的一个空白，如显微裂纹的形成、亚晶界的形成；

3 镁合金晶体塑性有限元研究现存的问题

目前镁合金塑性变形的晶体塑性有限元研究已经实现了从微观的晶粒内位错滑移、孪生和退孪生影响，到介观层面的晶粒组织形貌和晶粒取向演变、晶粒再结晶，以及宏观层面的力学性能和应变分布，已经形成多尺度研究镁合金的塑性变形机理，但研究还存在以下问题

- 1) 塑性变形过程中的变形功部分转化为热的热效应尚待建立有效的数学模型；
- 2) 目前研究较多的是 AZ31 镁合金，有少量研究 AM30, ZK60 等，缺少更多种类的镁合金，同时由于镁合金中存在第二相，但目前晶体塑性有限元模型中很少有研究晶体内部和晶界部位的第二相对变形机理和宏观力学性能的影响；
- 3) 当前大多数晶体塑性有限元研究为单向拉伸或

4 结论

今后晶体塑性有限元方法在镁合金塑性成形的未来研究中将侧重以下几个领域进行研究：

- 1) 位错、孪晶和层错相互交互作用对晶粒组织形貌影响的研究，这方面涉及位错、孪晶和层错运动过程中的增殖和拓扑变化，以及他们的增殖与拓扑对镁合金亚晶形成的影响，这方面需要将他们的相互作用的量化描述出来；
- 2) 连续性模型没有考虑到塑性功转化为热量，因此由塑性功计算的变形储能会与实际有偏差，热机械作用和高应变速率下的镁合金晶体塑性行为也有待进一步深入研究。
- 3) 镁合金在塑性变形过程中第二相粒子对镁合金宏观塑性行为影响机理的晶体塑性有限元模型，包括软粒子和硬粒子对晶体内部、晶粒边界的变形影响，以及晶粒边界跟踪、塑性变形过程中的缺陷产生和缺陷扩展的影响机理；

- 4) 镁合金的晶界、亚晶界在塑性变形中对晶粒变形的影响研究, 晶界在晶粒之间协调变形中的作用机理, 以及晶界拓扑变化对晶粒内部和晶粒之间的变形能量分布影响;
- 5) 高效率的计算方法实现多尺度快速计算, 进而实现短周期的多种研究方法的耦合使用, 比如相场方法与晶体塑性有限元方法的耦合, 界面跟踪算法与晶体塑性有限元方法耦合, 形成高效率多尺度模拟;

致谢

感谢潍坊科技学院人才专项 2018RSC001, 硕导科研项目资助 (2018WKSD009, 2018WKSD010), 潍坊市科技局科研项目资助 (2019GX079), 潍坊科技学院 2022 校级课题资助 (2022KJ10)。

参考文献

- [1] Alaneme, K. K. and Okotete, E. A., Enhancing plastic deformability of Mg and its alloys—A review of traditional and nascent developments. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2017. 5 (4): p. 460-475.
- [2] 陈振华, 镁合金. 2004: 化学工业出版社. Chen Zhenhua, *Magnesium Alloy*, 2004, Chemical Industrial Press.
- [3] 刘义鹤, 江洪, 镁合金在轨道交通装备中的应用和展望. *新材料产业*, 2018 (10): p. 20-22.
- [4] 卢振华, 杨红平, 刘博, 镁合金变形机制及温度对其轧制组织影响的研究进展. *热加工工艺*, 2018. 47 (13): p. 13-17.
- [5] 王娜, 雷丽萍, 方刚, 等, 镁合金变形的晶体塑性有限元分析. *稀有金属*, 2008. 32 (6): p. 766-773.
- [6] Taylor, G. I., Plastic Strain in Metals. *Journal of the Institute of Metals*, 1938. 62: p. 307-324.
- [7] Asaro, R. J., Needleman, A., Texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals. *Acta Metall.*, 1985. 33: p. 923-953.
- [8] Zhang, C., Li, H., Eisenlohr, P., et al., Effect of realistic 3D microstructure in crystal plasticity finite element analysis of polycrystalline Ti-5Al-2.5Sn. *International Journal of Plasticity*, 2015. 69: p. 21-35.
- [9] Raabe, D. and Becker, R. C., Coupling of a crystal plasticity finite-element model with a probabilistic cellular automaton for simulating primary static recrystallization in aluminium. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 2000. 8: p. 445-462.
- [10] Bate, P., Modelling deformation microstructure with the crystal plasticity finite-element method, in *Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1999, The Royal Society. p. 1589-1601.
- [11] Abdolvand, H., Daymond, M. R. and Mareau, C., Incorporation of twinning into a crystal plasticity finite element model: Evolution of lattice strains and texture in Zircaloy-2. *International Journal of Plasticity*, 2011. 27 (11): p. 1721-1738.
- [12] Abdolvand, H., Majkut, M., Oddershede, J., et al., Study of 3-D stress development in parent and twin pairs of a hexagonal close-packed polycrystal: Part II – crystal plasticity finite element modeling. *Acta Materialia*, 2015. 93: p. 235-245.
- [13] Sakamoto, J., H. Ohara, and T. Shibutani, Finite element analysis of thermal and mechanical stresses due to the grain anisotropy of polycrystalline β -Sn. *Microelectronics Reliability*, 2017. 71: p. 29-34.
- [14] Tadano, Y., Yoshida, K., and Kuroda, M., Plastic flow localization analysis of heterogeneous materials using homogenization-based finite element method. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2013. 72: p. 63-74.
- [15] Yusuke Tsunemi, M.K., Shigeru Yonemura, Akihiro Uenishi, Crystal Plasticity Analysis of Anisotropic Work Hardening Behavior in IF steel, in *International Conference on the Technology of Plasticity, ICTP2017*. 2017: Cambridge, United Kingdom. p. 2095-2100.
- [16] Ma, R., Truster, T. J., Puplampu, S., et al., Investigating mechanical degradation due to fire exposure of aluminum alloy 5083 using crystal plasticity finite element method. *International Journal of Solids and Structures*, 2018. 134: p. 151-160.
- [17] Povall, T. M., McBride, A. T., and Reddy, B. D., Finite element simulation of large-strain single-crystal viscoplasticity: An investigation of various hardening relations. *Computational Materials Science*, 2014. 81: p. 386-396.
- [18] Li, J., Proudhon, H., Roos, A., et al., Crystal plasticity finite element simulation of crack growth in single crystals. *Computational Materials Science*, 2014. 94: p. 191-197.
- [19] Roters, F., Eisenlohr, P., Hantcherli, L., et al., Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: Theory, experiments, applications. *Acta Materialia*, 2010. 58 (4): p. 1152-1211.
- [20] Grilli, N., Janssens, K. G. F., Nellessen, J., et al., Multiple slip dislocation patterning in a dislocation-based crystal plasticity finite element method. *International Journal of Plasticity*,

2018. 100: p. 104-121.
- [21] Rousseau, T., Nougier-Lehon, C., Gilles, P., et al., Finite element multi-impact simulations using a crystal plasticity law based on dislocation dynamics. *International Journal of Plasticity*, 2018. 101: p. 42-57.
- [22] Si, L.-y., Cheng, L. Tieu, K., et al., Simulation of polycrystalline aluminum tensile test with crystal plasticity finite element method. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2007. 17 (6): p. 1412-1416.
- [23] Benedetti, I., Gulizzi, V. and Mallardo V., A grain boundary formulation for crystal plasticity. *International Journal of Plasticity*, 2016. 83: p. 202-224.
- [24] Raabe, D., Ma, D. and Roters, F., Effects of initial orientation, sample geometry and friction on anisotropy and crystallographic orientation changes in single crystal microcompression deformation: A crystal plasticity finite element study. *Acta Materialia*, 2007. 55 (13): p. 4567-4583.
- [25] Paranjape, H. M., Manchiraju, S. and Anderson, P. M. A phase field – Finite element approach to model the interaction between phase transformations and plasticity in shape memory alloys. *International Journal of Plasticity*, 2016. 80: p. 1-18.
- [26] Lee, M.-G., Kim, S.-J. and Han, H. N., Crystal plasticity finite element modeling of mechanically induced martensitic transformation (MIMT) in metastable austenite. *International Journal of Plasticity*, 2010. 26 (5): p. 688-710.
- [27] Ardeljan, M., Beyerlein, I. J. and Knezevic, M., A dislocation density based crystal plasticity finite element model: Application to a two-phase polycrystalline HCP/BCC composites. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014. 66: p. 16-31.
- [28] Madej, L., Sitko, M., Legwand, A., et al., Development and evaluation of data transfer protocols in the fully coupled random cellular automata finite element model of dynamic recrystallization. *Journal of Computational Science*, 2018. 26: p. 66-77.
- [29] Takaki, T. and Y. Tomita, Static recrystallization simulations starting from predicted deformation microstructure by coupling multi-phase-field method and finite element method based on crystal plasticity. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2010. 52 (2): p. 320-328.
- [30] 唐伟琴, 李大永, 彭颖红, AZ31 镁合金板材冲压成形制耳的晶体塑性模拟. *中国有色金属学报*, 2014. 24 (8): p. 1933-1940.
- [31] Cheng, J. and Ghosh, S. Crystal plasticity finite element modeling of discrete twin evolution in polycrystalline magnesium. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017. 99: p. 512-538.
- [32] Choi, S. H., Kim, D. H., Lee, H. W., et al., Simulation of texture evolution and macroscopic properties in Mg alloys using the crystal plasticity finite element method. *Materials Science and Engineering: A*, 2010. 527 (4-5): p. 1151-1159.
- [33] 蓝永庭, 陆大敏, 刘贵龙, 等, AZ31 镁合金晶体塑性行为与细观非均匀变形的数值模拟. *中国有色金属学报*, 2014. 24 (12): p. 2985-2994.
- [34] Choi, S. H., Kim, D. H., Park, S. S., et al., Simulation of stress concentration in Mg alloys using the crystal plasticity finite element method. *Acta Materialia*, 2010. 58 (1): p. 320-329.
- [35] Tadano, Y., Yoshihara, Y. and Hagihara S., A crystal plasticity modeling considering volume fraction of deformation twinning. *International Journal of Plasticity*, 2016. 84: p. 88-101.
- [36] Ardeljan, M., Beyerlein, I. J., McWilliams, B. A., et al., Strain rate and temperature sensitive multi-level crystal plasticity model for large plastic deformation behavior: Application to AZ31 magnesium alloy. *International Journal of Plasticity*, 2016. 83: p. 90-109.
- [37] 彭颖红, 唐伟琴, 张少睿, 等, 基于滑移/孪生耦合模型的镁合金多晶体塑性成形分析. *塑性工程学报*, 2009. 16 (5): p. 165-168.
- [38] Tang, W., Zhang, S., Peng, Y., et al., Simulation of magnesium alloy AZ31 sheet during cylindrical cup drawing with rate independent crystal plasticity finite element method. *Computational Materials Science*, 2009. 46 (2): p. 393-399.
- [39] Hu, S., Henager, C. H., Chen, L., et al, Simulations of stress-induced twinning and de-twinning: A phase field model. *Acta Materialia*, 2010. 58 (19): p. 6554-6564.
- [40] Heo, T. W., Wang Y., Bhattacharya, S., et al., A phase-field model for deformation twinning. *Philosophical Magazine Letters*, 2011. 91 (2): p. 110-121.
- [41] Huang, S.y., Zhang S. R., Li, D. Y., et al., Simulation of texture evolution during plastic deformation of FCC, BCC and HCP structured crystals with crystal plasticity based finite element method. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2011. 21 (8): p. 1817-1825.
- [42] Shin, E. J., Jung, A., Choi, S. H., et al., A theoretical prediction of twin variants in extruded AZ31 Mg alloys using the microstructure based crystal plasticity finite element method. *Materials Science and Engineering: A*, 2012. 538: p. 190-201.
- [43] Abdolvand, H. and Daymond, M. R., Multi-scale modeling and experimental study of twin inception and propagation in hexagonal close-packed materials using a crystal plasticity

- finite element approach—Part I: Average behavior. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2013. 61 (3): p. 783-802.
- [44] 蓝永庭, 李武军, 李启裘, 等, AZ31 镁合金单晶初始屈服行为的数值模拟. *广西科技大学学报*, 2015. 26 (3): p. 18-23.
- [45] Abdolvand, H., Majkut, M., Oddershede, J., et al., On the deformation twinning of Mg AZ31B: A three-dimensional synchrotron X-ray diffraction experiment and crystal plasticity finite element model. *International Journal of Plasticity*, 2015. 70: p. 77-97.
- [46] 杨冲, 彭艳, 杨硕, 等, AZ31 镁合金轧制板材各向异性行为的晶体塑性研究. *燕山大学学报*, 2016. 40 (3): p. 123-129.
- [47] Ardeljan, M., Beyerlein, I. J. and Knezevic, M., Effect of dislocation density-twin interactions on twin growth in AZ31 as revealed by explicit crystal plasticity finite element modeling. *International Journal of Plasticity*, 2017. 99: p. 81-101.
- [48] Cheng, J. H., Shen, J. L., Mishra, R. K., et al., Discrete twin evolution in Mg alloys using a novel crystal plasticity finite element model. *Acta Materialia*, 2018. 149: p. 142-153.
- [49] Zhou, R., Roy, A., and Silberschmidt, V. V., A crystal-plasticity model of extruded AM30 magnesium alloy. *Computational Materials Science*, 2019. 170: p. 109140.
- [50] Bong, H. J., Lee, J. W., Hu, X. H., et al., Predicting forming limit diagrams for magnesium alloys using crystal plasticity finite elements. *International Journal of Plasticity*, 2020. 126: p. 102630.
- [51] Li, H., Kang, G., and Yu, C., Modeling uniaxial ratchetting of magnesium alloys by a new crystal plasticity considering dislocation slipping, twinning and detwinning mechanisms. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2020. 179: p. 105660.
- [52] Zhang, H., Jérusalem A., Salvati E., et al., Multi-scale mechanisms of twinning-detwinning in magnesium alloy AZ31B simulated by crystal plasticity modeling and validated via in situ synchrotron XRD and in situ SEM-EBSD. *International Journal of Plasticity*, 2019. 119: p. 43-56.
- [53] Jalili, M., Soltani, B., Papazafeiropoulos, G., et al., Micromechanical modeling of cyclic plastic deformation of ZK60 Mg alloy using 3D full-field crystal plasticity coupled with computational homogenization. *International Journal of Fatigue*, 2020. 140: p. 105794.