

## 增材制造微结构演化及疲劳分散性计算

易 敏, 常 珂, 梁晨光, 周留成, 杨阳玮, 易 新, 薛柏香

### COMPUTATIONAL STUDY OF EVOLUTION AND FATIGUE DISPERSITY OF MICROSTRUCTURES BY ADDITIVE MANUFACTURING

Yi Min, Chang Ke, Liang Chenguang, Zhou Liucheng, Yang Yangwei, Yi Xin, and Xu Baixiang

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-389>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

#### 面向增材制造的应力最小化连通性拓扑优化

ADDITIVE MANUFACTURING-ORIENTED STRESS MINIMIZATION TOPOLOGY OPTIMIZATION WITH CONNECTIVITY  
力学学报. 2021, 53(4): 1070–1080

#### 增材制造中滚筒铺粉工艺参数对尼龙粉体铺展性的影响研究

RESEARCH ON THE EFFECTS OF ROLLER-SPREADING PARAMETERS FOR NYLON POWDER SPREADABILITY IN ADDITIVE MANUFACTURING  
力学学报. 2021, 53(9): 2416–2426

#### 基于微结构动态演化机制的单晶镍基高温合金晶体塑性本构及其有限元模拟

MICROSTRUCTURE EVOLUTION MECHANISM BASED CRYSTAL-PLASTICITY CONSTITUTIVE MODEL FOR NICKEL-BASED SUPERALLOY AND ITS FINITE ELEMENT SIMULATION  
力学学报. 2017, 49(4): 763–781

#### 纯铜后继屈服面的测试与晶体塑性模型模拟

MEASURING SUBSEQUENT YIELD SURFACE OF PURE COPPER BY CRYSTAL PLASTICITY SIMULATION  
力学学报. 2017, 49(4): 870–879

#### 数字化光处理立体成型技术中吸附力的影响机制

SUCTION FORCE ANALYSIS FOR DIGITAL LIGHT PROCESSING-BASED PROJECTION STEREOLITHOGRAPHY  
力学学报. 2021, 53(7): 1981–1991

#### 考虑晶体滑移面分解正应力的细观损伤模型

MICROSCOPIC DAMAGE MODEL CONSIDERING THE RESOLVED NORMAL STRESS ON CRYSTAL SLIP PLANE  
力学学报. 2021, 53(5): 1355–1366



关注微信公众号，获得更多资讯信息

# 增材制造微结构演化及疲劳分散性计算<sup>1)</sup>

易 敏 \*<sup>,†,2)</sup> 常 珂<sup>†</sup> 梁晨光<sup>†</sup> 周留成<sup>\*\*</sup> 杨阳祎玮<sup>††</sup> 易 新<sup>\*\*\*</sup> 胥柏香<sup>††</sup>

\*(南京航空航天大学机械结构力学及控制国家重点实验室, 南京 210016)

†(南京航空航天大学航空学院, 南京 210016)

\*\* (空军工程大学等离子体重点实验室, 西安 710038)

†† (达姆施塔特工业大学材料系, 德国达姆施塔特 D-64287)

\*\*\* (北京大学工学院, 北京 100871)

**摘要** 为了预测增材制造中工艺参数–微结构–力学性能之间的关联规律, 提出了集成离散元、相场模拟、晶体塑性有限元和极值概率理论的计算方法, 揭示了激光扫描速度对微结构演化、屈服应力和疲劳分散性的影响。首先, 采用离散元实现了重力作用下粉床在已凝固层表面上的逐层铺设; 其次, 通过热–熔体–微结构耦合的非等温相场模拟, 获得了熔体、气孔、晶界、晶粒取向等的时空演化以及最终形成的多晶微结构; 然后, 应用晶体塑性有限元计算了增材制造多晶微结构的宏观力学响应, 并得到表征疲劳裂纹萌生驱动力的疲劳指示参数 (FIP); 最后, 采用极值概率理论分析了增材制造多晶微结构的 FIP 极值分布规律及疲劳分散性。以 316L 不锈钢选区激光熔化增材制造为例的计算结果表明: 增材制造微结构的宏观屈服强度随激光扫描速度的增加而降低, 且呈各向异性; FIP 极值符合 Gumbel 极值分布规律, 激光扫描速度增加可降低增材制造微结构疲劳分散性, 但会导致 FIP 极值升高, 使得疲劳裂纹萌生驱动力增加, 疲劳寿命降低。

**关键词** 增材制造, 相场模拟, 微结构演化, 疲劳分散性, 疲劳指示参数, 晶体塑性

中图分类号: TB301 文献标识码: A doi: [10.6052/0459-1879-21-389](https://doi.org/10.6052/0459-1879-21-389)

## COMPUTATIONAL STUDY OF EVOLUTION AND FATIGUE DISPERSITY OF MICROSTRUCTURES BY ADDITIVE MANUFACTURING<sup>1)</sup>

Yi Min \*<sup>,†,2)</sup> Chang Ke<sup>†</sup> Liang Chenguang<sup>†</sup> Zhou Liucheng<sup>\*\*</sup> Yang Yangyiwei<sup>††</sup> Yi Xin<sup>\*\*\*</sup> Xu Baixiang<sup>††</sup>

\* (State Key Laboratory of Mechanics and Control of Mechanical Structures, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

† (College of Aerospace Engineering, Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, Nanjing 210016, China)

\*\* (Science and Technology on Plasma Dynamics Laboratory, Air Force Engineering University, Xi'an 710038, China)

†† (Department of Materials and Earth Sciences, TU Darmstadt, Darmstadt D-64287, Germany)

\*\*\* (College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China)

**Abstract** In order to predict the correlation among the processing parameters, microstructures, and mechanical properties for additive manufacturing, a computational framework integrating discrete element method, phase-field

2021-08-12 收稿, 2021-09-12 录用, 2021-09-13 网络版发表。

1) 国家海外高层次人才引进计划青年项目, 航空发动机及燃气轮机重大专项(J2019-IV-0014-0082)和中央高校基本科研业务费和德国科学基金 DFG (CRC-TRR 270, DFG YI 165/1-1)资助项目。

2) 易敏, 教授, 主要研究方向: 先进材料结构和先进制造的多尺度多场耦合力学。E-mail: [yimin@nuaa.edu.cn](mailto:yimin@nuaa.edu.cn)

引用格式: 易敏, 常珂, 梁晨光, 周留成, 杨阳祎玮, 易新, 胥柏香. 增材制造微结构演化及疲劳分散性计算. 力学学报, 2021, 53(12): 3263-3273

3273

Yi Min, Chang Ke, Liang Chenguang, Zhou Liucheng, Yang Yangyiwei, Yi Xin, Xu Baixiang. Computational study of evolution and fatigue dispersity of microstructures by additive manufacturing. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2021, 53(12): 3263-3273

simulation, crystal plasticity finite element method, and extreme value statistics is proposed. The framework is applied to reveal the influence of laser scanning velocity on the microstructure evolution, yield stress, fatigue indicator parameter (FIP) distribution, and fatigue dispersity, in order to show its capability in simulating additive manufacturing process and the resultant mechanical properties. Firstly, discrete element method simulations are carried out to spread the powder bed layer by layer with the consideration of powder size distribution. The spreading is performed on the curved surface of the previously solidified layer. Secondly, the heat-melt-microstructure coupled non-isothermal phase-field simulations are performed to obtain the temporal and spatial evolution of melt, pore, grain boundary, grain distribution/orientation, etc., as well as the final polycrystal microstructure. Thirdly, crystal plasticity finite element method is utilized to attain the macroscopic mechanical response and stress/strain distribution of the additively manufactured polycrystal microstructure (AMPM) and FIP which is a surrogate measure for the driving force to form fatigue cracks. Fourthly, extreme value statistics are carried out to analyze the extreme value distribution of FIPs and the fatigue dispersity of the AMPM. Comprehensive simulations are put into practice for the selective laser melting based additive manufacturing of a typical metallic material 316L stainless steel. The simulation results indicate that the macroscopic yield stress of the AMPM is anisotropic and decreases with the increasing laser scanning velocity. The extreme value of FIPs from the AMPM with random distribution of grain orientations correlates well with the Gumbel extreme value distribution. The increase of laser scanning velocity could decrease the fatigue dispersity of the AMPM, but increase the FIP extremum and the associated driving force for fatigue crack initiation and thus notably decrease the fatigue life.

**Key words** additive manufacturing, phase-field simulation, microstructure evolution, fatigue dispersity, fatigue indicator parameter, crystal plasticity

## 引言

增材制造通过不断添加材料来完成零件的加工成型, 满足了工业对零件形状、功能、材料的更高要求, 成为当前材料加工技术发展的前沿方向。与传统制造工艺相比, 增材制造在成形原理、材料形态、制件性能上发生了根本改变, 具有材料浪费少、加工工序少、加工周期短、零件结构设计自由、易于实现形状复杂零部件快速成型等优点, 被认为是能够深刻影响未来的战略前沿技术<sup>[1-3]</sup>。

增材制造零部件在航空航天、医疗仪器、轨道交通等战略新兴产业领域内作为承载结构件应用时, 其力学性能至关重要。而增材制造零部件的力学性能又与增材制造工艺产生的微结构紧密相关, 增材制造工艺参数、微结构及其演化、力学性能之间的关联规律, 显得尤为重要。然而在实际生产过程中, 增材制造所涉及的物理过程极其复杂, 一次成功制造零部件的概率较低。影响增材制造工艺的因素很多, 包括粉末的物理性质、激光参数、扫描速度、粉床厚度和扫描策略等, 若采用传统的实验试错法去优化微结构和力学性能, 将极大增加产品的制造周期和生产成本。采用数值模拟来优化增材制造工艺参数及其导致的微结构和力学性能, 可以弥补实验试错法的不足<sup>[4-7]</sup>。以微结构演化和力学性能为核心的数值模拟, 已成为加快增材制造材料与产品研

发、降低生产成本、提升增材制造产能的重要手段。

在增材制造微结构演化模拟方面, 目前常用的方法有相场法、元胞自动机法和动力学蒙特卡洛法等。对于相场方法, 大多数研究采用顺序耦合策略, 即先求出温度的时空变化, 然后将其作为输入参数导入相场模拟。比如 Sahoo 和 Chou<sup>[8]</sup> 以温度梯度和凝固速度为输入参数, 采用等温相场模型计算了增材制造中微观尺度的枝晶形貌变化; Liu 等<sup>[9]</sup> 将预先得到的温度信息输入到非等温相场模拟, 在介观尺度研究了金属增材制造过程中的晶粒生长问题; Yan 等<sup>[10]</sup> 将粉末尺度热-流模型的温度结果输入到三维相场模拟, 计算了增材制造过程中晶粒形核、生长和粗化的微结构演化历程。最近, Lu 等<sup>[11]</sup> 直接在粉末尺度考虑了含激光热源的热传导方程与相场演化方程的耦合, 并综合考虑了气/液/固相、粉末熔化、熔体凝固和晶粒生长过程; Yang 等<sup>[12-16]</sup> 进一步发展了热-熔体-微结构耦合的非等温相场模型, 可揭示增材制造中局部温度剧烈变化和极大温度梯度造成的微结构演化特征。

元胞自动机法也被广泛应用于金属增材制造的微结构演化。Lian 等<sup>[17]</sup> 基于 MPI 技术开展了金属增材制造三维元胞自动机算法的并行化研究, 预测了选区电子束熔融工艺 Ti-6Al-4V 合金的凝固初生相, 并进一步建立了外延式生长成核模型<sup>[18]</sup>。魏雷等<sup>[19]</sup>

采用元胞自动机模拟了激光立体成形过程中温度场分布、熔池形貌和凝固微观组织。元胞自动机法也可与其他方法耦合,比如 Lian 等<sup>[18]</sup> 和 Yan 等<sup>[20]</sup>等将热流耦合模型与元胞自动机法进行顺序耦合,Rai 等<sup>[21-22]</sup>将热流耦合模型的格子玻尔兹曼方法与元胞自动机法进行了弱耦合。

最近, Wang 等<sup>[23]</sup> 采用有限体积法和离散元法相结合的方法模拟了 Ti-6Al-4V 合金粉末颗粒的沉积,可复现金属增材制造球化、局部熔化、未融合等现象,预测增材制造产品的内部缺陷。美国劳伦斯利弗莫尔国家实验室的金属增材制造研究组<sup>[24]</sup>也开发了 ALE3D 程序,开展了粉末尺度的高保真热-流-固耦合及微结构演化的数值模拟。

在增材制造微结构力学性能计算方面,目前主流方法是晶体塑性有限元。比如 Ahmadi 等<sup>[25]</sup> 采用晶体塑性有限元计算了 SLM 不锈钢微结构的力学性能,计算结果与实验吻合较好; Yan 等<sup>[20]</sup> 基于晶体塑性自洽聚类分析方法,采用疲劳指示参数计算了材料微结构决定的疲劳性能; 张昭等<sup>[26]</sup> 针对同轴送粉激光熔覆增材制造,采用考虑粒子数量的热源模型和 Monte Carlo 算法获得了双相钛合金微观结构,并进一步采用晶体塑性有限元预测了所得微结构的力学性能; Liu 等<sup>[27]</sup> 为了提高晶体塑性模型的计算效率,采用了基于快速傅里叶变换的弹黏塑性模型,计算了含双相的钛合金微结构的力学行为。

在增材制造的工艺参数-微结构-力学性能关联计算方面,主要是将多种模型和算法按顺序耦合进行计算。比如 Yan 等<sup>[20]</sup> 首先采用粉末铺展和热-流模型计算了不同工艺参数下的温度演化和孔洞形成,然后将这些信息传递给元胞自动机模型计算晶粒结构,进一步将含有晶粒和孔洞的结构信息传递至降阶的细观力学模型计算力学性能; 类似地,Liu 等<sup>[27]</sup> 首先在宏观尺度采用有限元计算了热响应,然后将热历史信息输入到温度相关的晶粒生长相场模型计算晶粒形貌演化,最后基于快速傅里叶变换的弹粘塑性模型计算了所得到微结构的力学性能。最近, DebRoy 等<sup>[28]</sup> 和 Smith 等<sup>[29]</sup> 针对金属增材制造过程参数、结构与性能之间的关联,在实验和计算方面均做了详细综述。

本文为了预测增材制造中工艺参数-微结构-力学性能之间的关联规律,实现粉床铺设、微结构演化和力学性能计算,提出了集成离散元、相场模拟、晶体塑性有限元和极值概率理论的计算方法,

研究了激光扫描速度对微结构演化、屈服应力和疲劳分散性的影响,以期为增材制造零部件力学性能的优化提供数值模拟方法。

## 1 计算框架及模型

本文采用的计算框架及流程如图 1 所示,具体包括:(1)采用离散元方法(DEM)<sup>[30]</sup>生成粉末颗粒具有特定分布规律的粉床,粉末颗粒在重力作用下自由沉降,第一层以水平线为基板生成粉床,后续粉床生成以上一层已凝固表面形貌(一般为曲线/面)为基板;(2)以粉床为基础,采用非等温相场模拟计算增材制造微结构演化,包括粉末熔化、热传导、熔体流动、气泡/孔洞演化、凝固、晶界迁移、晶粒生长和粗化等;(3)采用晶体塑性有限元计算增材制造所得微结构的应力-应变响应,并对晶粒取向进行随机取样,计算有限个多晶微结构的力学响应,再统计平均求得屈服强度;(4)计算有限个多晶微结构在不同应变幅下的循环应力-应变曲线及疲劳指示参数(fatigue indicator parameter, FIP),并确定每个晶粒中最大的体积平均 FIP,表征晶粒受到的裂纹萌生驱动力;(5)采用极值概率理论统计分析 FIP,确定不同载荷作用下的 FIP 极值概率分布规律,进而分析疲劳性能的分散性。

### 1.1 非等温相场模型

针对增材制造过程中高能集中热束作用产生的极大温度梯度和非平衡过程,本文采用作者前期发展的增材制造非等温相场模型<sup>[13]</sup>,全面考虑热传导、熔池流体动力学和微结构演化三者之间的耦合。描述微结构演化的相场模型采用以下序参量: $\rho$  表示熔体/晶粒( $\rho = 1$ )和气孔/孔隙( $\rho = 0$ ), $\phi$  表示固相( $\phi = 1$ ), $\rho - \phi$  表示液相( $\rho - \phi = 1$ ), $\eta_i$  表示粉末颗粒/晶粒的取向。基于本文作者前期工作<sup>[13,16]</sup>,该非等温相场模型的能量泛函为

$$\Theta = \int_{\Omega} [f_{ht}(T) + f_{loc}(T, \rho, \phi, \{\eta_i\}) + \hat{p}\Sigma_g + f_g(T, \nabla\rho, \nabla\phi, \{\nabla\eta_i\})] d\Omega \quad (1)$$

其中  $f_{ht}$  为热量贡献的自由能密度, $f_{loc}$  为相场模型的局部自由能密度, $f_g$  为相场模型的梯度自由能密度,此三者皆为温度  $T$  的函数; $\hat{p}$  和  $\Sigma_g$  分别是约束因子和约束函数。因篇幅所限,这些能量的具体表达式及详细的模型参数,请参考文献[13, 16]。

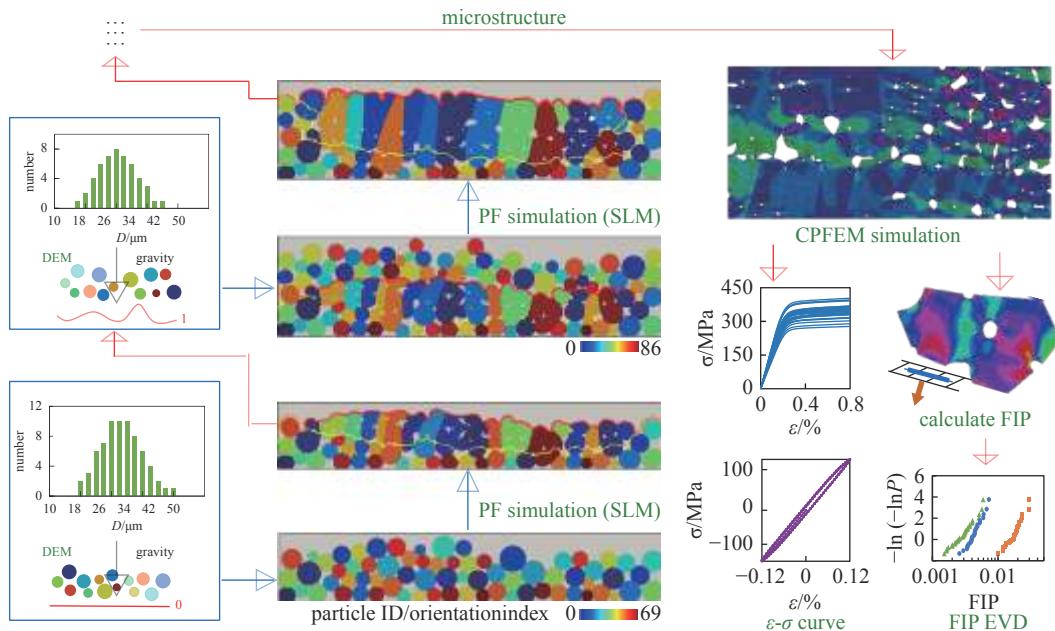


图1 用于增材制造微结构演化及疲劳分散性预测的集成离散元、相场模拟、晶体塑性有限元和极值概率理论的计算框架示意图 (DEM: 离散元; PF: 相场; CPFEM: 晶体塑性有限元; FIP: 疲劳指示参数; EVD: 极值分布)

Fig. 1 Computational framework integrating discrete element method, phase-field simulation, crystal plasticity finite element method, and extreme value statistics for the prediction of evolution and fatigue dispersity of microstructures by additive manufacturing (DEM: discrete element method; PF: phase field; CPFEM: crystal plasticity finite element method; FIP: fatigue indicator parameter; EVD: extreme value distribution)

根据式(1)的能量泛函可推导出该非等温相场模型的主要控制方程。控制序参量 $\phi$ 演化的方程为

$$\frac{D\phi}{Dt} = -L_\phi \frac{\delta\Theta}{\delta\phi} \quad (2)$$

控制序参量 $\eta_i$ 演化的方程为

$$\frac{D\eta_i}{Dt} = -L_\eta \frac{\delta\Theta}{\delta\eta_i} \quad (3)$$

控制序参量 $\rho$ 演化的方程为

$$\frac{D\rho}{Dt} = \nabla \cdot \left[ \mathbf{M} \cdot \nabla \frac{\delta\Theta}{\delta\rho} + \mathbf{M}_{th} \cdot \left( \frac{\delta\Theta}{\delta\rho} \frac{\nabla T}{T} \right) \right] \quad (4)$$

其中 $L_\phi$ 和 $L_\eta$ 分别是控制固液界面移动速度和晶界迁移速度的参数,  $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{M}_{th}$ 分别对应扩散传质和热泳传质的迁移率张量,  $D(\cdot)/Dt$ 为物质导数,  $\delta$ 为变分算符。

控制温度 $T$ 演化的热传导方程为

$$c_r \frac{DT}{Dt} + \frac{\partial e}{\partial \rho} \frac{D\rho}{Dt} + \frac{\partial e}{\partial \phi} \frac{D\phi}{Dt} + \sum_i \frac{\partial e}{\partial \eta_i} \frac{D\eta_i}{Dt} = \nabla \cdot (\mathbf{k} \cdot \nabla T) + \boldsymbol{\sigma} : \nabla \mathbf{u} + q_v \quad (5)$$

式(5)中 $c_r$ 为体积比热容函数,  $e$ 是内能的体积密度,  $\mathbf{k}$ 为热导率张量,  $\boldsymbol{\sigma}$ 为柯西应力张量。 $q_v = \Phi_{ss} \beta P_0 p_{xz}(x, z, x_v, z_v) p_y(y, y_v)$ 是增材制造过程中高能

集中热束的体积功率密度, 其中 $P_0$ 为激光功率, 本文固定为400 W;  $(x_v, z_v, y_v)$ 为激光中心的位置, 是扫描速度 $v$ 的函数, 可用来实现不同激光扫描策略;  $\Phi_{ss}$ 是表征熔体/晶粒和气孔/孔隙的插值函数,  $\beta$ 是激光吸收系数,  $p_{xz}$ 和 $p_y$ 分别是激光能量的xz面内和深度方向y上的分布函数。 $q_v$ 和 $e$ 具体表达式见本文作者前期工作<sup>[13, 16]</sup>。

熔池流动速度场的控制方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (6)$$

$$\varphi \frac{D\mathbf{u}}{Dt} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}_k + \mathbf{b} \quad (7)$$

其中 $\varphi$ 为密度,  $\mathbf{u}$ 为熔体流动的速度场,  $p$ 为静水压,  $\nu$ 为动力黏性系数,  $\mathbf{b}$ 为质量力,  $\boldsymbol{\sigma}_k$ 为Korteweg应力张量。

式(2)~式(7)采用有限元方法求解, 在开源代码MOOSE (multiphysics object-oriented simulation environment)<sup>[31]</sup>框架下编写有限元程序, 并采用PETSc和MPI实现并行计算。

## 1.2 晶体塑性模型

采用晶体塑性模型计算增材制造微结构的力学性能, 本文仅对该模型做简要概述。根据有限变形条件下的乘法分解, 总变形梯度张量 $\mathbf{F}$ 可分解为弹性

部分  $\mathbf{F}^e$  和塑性部分  $\mathbf{F}^p$ , 即  $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$ .  $\mathbf{F}^p$  的时间变化率与晶体中第  $\alpha$  个滑移系的滑移率  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  相关, 即

$$\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \mathbf{m}^{(\alpha)} \quad (8)$$

其中单位矢量  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$  和  $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  分别表示参考构型下滑移方向和滑移面法向, 增材制造微结构中每个晶粒的取向可通过定义  $\mathbf{s}^{(\alpha)}$  和  $\mathbf{m}^{(\alpha)}$  来间接反映. 滑移率  $\gamma^{(\alpha)}$  取决于 Schmid 应力  $\tau^{(\alpha)} = \mathbf{m}^{*(\alpha)} \cdot \rho_0 / \rho \sigma \cdot \mathbf{s}^{*(\alpha)}$ , 可表示为

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{n-1} \quad (9)$$

其中  $\dot{a}^{(\alpha)}$  是第  $\alpha$  个滑移系的初始滑移率,  $\mathbf{s}^{*(\alpha)}$  和  $\mathbf{m}^{*(\alpha)}$  分别表示当前构型下的滑移方向和滑移面法向,  $\rho_0$  和  $\rho$  分别是参考构型和当前构型下的密度. 滑移阻力  $g^{(\alpha)}$  的时间演化表示材料硬化, 即有

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (10)$$

其中  $h_{\alpha\beta}$  是硬化模量, 即

$$h_{\alpha\beta} = h_0 \operatorname{sech}^2 \left\{ \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| [q + (1-q) \delta_{\alpha\beta}] \right\} \quad (11)$$

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}(\chi)| d\chi \quad (12)$$

其中  $h_0$  是初始硬化模量,  $\tau_0$  是初始屈服应力或滑移阻力,  $\tau_s$  是饱和滑移阻力,  $q$  是潜硬化系数, 用以区分自硬化 ( $\alpha = \beta$ ) 和潜硬化 ( $\alpha \neq \beta$ ),  $\gamma$  是所有滑移系上泰勒累积剪切应变. 该模型的数值计算采用 Huang<sup>[32]</sup> 的 ABAQUS 有限元子程序, 并根据 FIP 的计算要求对该子程序进行了修改. 本文研究的 316L 不锈钢晶粒为 FCC 结构, 具有 12 个滑移系, 其弹性常数为<sup>[25]</sup>:  $C_{iiii} = 163.68 \text{ GPa}$ ,  $C_{iijj} = 110.16 \text{ GPa}$ ,  $C_{ijij} = 100.96 \text{ GPa}$ ; 晶体塑性参数为<sup>[25]</sup>:  $\dot{a}^{(\alpha)} = 0.001$ ,  $n = 10$ ,  $h_0 = 75 \text{ MPa}$ ,  $\tau_0 = 75 \text{ MPa}$ ,  $\tau_s = 150 \text{ MPa}$ ,  $q = 1$ .

### 1.3 疲劳指示参数计算

疲劳指示参数 (FIP) 是表征疲劳裂纹萌生驱动力的替代指标, FIP 值越大所对应于的裂纹萌生驱动力也越大. 早期 Fatemi 和 Socie<sup>[33]</sup> 期望将多个晶粒内的疲劳裂纹萌生寿命 (含裂纹形成和扩展) 关联到几百微米尺度的寿命, 提出了基于临界平面的以剪切应变主导裂纹萌生的 FIP. McDowell 和 Berard<sup>[34]</sup> 发现该 FIP 可将微裂纹扩展速率与弹塑性

断裂力学的  $\Delta J$  积分关联起来. 进一步, 文献 [35-38] 提出了 FIP 的晶体学版本, 定义了每个滑移系  $\alpha$  的 FIP, 即

$$FIP_{\alpha} = \frac{\Delta\gamma^{\alpha}}{2} \left( 1 + k_e \frac{\sigma_n^{\alpha}}{\sigma_y} \right) \quad (13)$$

其中  $\Delta\gamma^{\alpha}$  是  $\alpha$  滑移系的循环塑性剪切应变范围,  $\sigma_n^{\alpha}$  是作用在  $\alpha$  滑移系的滑移面上的最大正应了,  $k_e$  是表征最大正应力影响的常数,  $\sigma_y$  是材料的宏观屈服强度. 他们发现对于单晶中沿着滑移带界面的裂纹, 以及无滑移带的均匀单晶中的裂纹,  $FIP_{\alpha}$  可与循环裂纹尖端位移关联起来<sup>[35]</sup>, 且可利用  $FIP_{\alpha}$  计算 IN100 合金中微结构小裂纹的扩展速率<sup>[39]</sup>.

本文采用最后一个加载循环当中的  $\Delta\gamma^{\alpha}$  和  $\sigma_n^{\alpha}$  来计算  $FIP_{\alpha}$ , 在每个有限元网格的高斯积分点计算每个滑移系的  $FIP_{\alpha}$ . 考虑到疲劳损伤区域的物理尺寸要远大于晶体塑性有限元的网格尺寸, 有必要对  $FIP_{\alpha}$  进行体积平均, 最简单的方法是以每个晶粒的体积各自做平均, 但不同的晶粒尺寸会导致用于平均计算的体积差异较大, 且整个晶粒的平均会抹平一些单元中的  $FIP_{\alpha}$  极值. 对于结构化的立方体有限元网格 StopKa 和 McDowell<sup>[40-41]</sup> 发展了子带域法, 每个晶粒被剖分成不同的子带域, 每个子带域内的单元个数和体积相等, 在该子带域内计算  $FIP_{\alpha}$  的平均值. 本文的微结构形状不规则, 有限元网格是非结构化的, 难以采用上述子带域法. 考虑到微观结构短裂纹尺度在  $1 \sim 10 \mu\text{m}$  的量级<sup>[42]</sup>, 本文在边长恒为  $10 \mu\text{m}$  的立方区域内对  $FIP_{\alpha}$  进行体积平均.

### 1.4 极值统计分析

微结构中疲劳裂纹的萌生一般发生在裂纹萌生驱动力最大的区域, 也即需要确定体积平均 FIP 的极大值. 为了研究增材制造微结构疲劳分散性, 采用极值概率理论对体积平均 FIP 极大值进行统计分析. FIP 极值作为当前微结构中裂纹萌生的最大驱动力, 其概率分布特征将对应于疲劳的分散性, 两者具有关联.

对于增材制造得到的多晶微结构, 假设其晶粒取向服从均匀分布, 随机生成  $N$  个多晶微结构胞元. 然后采用晶体塑性有限元和体积平均 FIP 计算方法, 计算出给定循环载荷条件下各个多晶微结构的体积平均 FIP 的极大值, 总共获得  $N$  个极大值  $(y_1, y_2, \dots, y_N)$ . 若这些极值服从 Gumbel 极值分布函数<sup>[43]</sup>, 则有

$$P(y) = F_Y(y) = \exp\left[-\exp\left(-\frac{y-u_0}{\beta_0}\right)\right] \quad (14)$$

其中  $F_Y(y)$  是  $Y \leq y$  的概率,  $u_0$  是位置参数或特征极大值,  $\beta_0$  是尺度参数, 表征随机变量的分散程度. 将  $N$  个极大值按升序排列, 则概率为

$$P(y_j) = F_Y(y_j) = \frac{j-0.3}{N+0.4} \quad (15)$$

其中  $j$  是极值  $y_j$  在升序排列中的序号.  $P(y_j)$  越大, 多晶微结构的失效概率越大, 疲劳裂纹的萌生寿命也越短. 对式 (14) 进行变换可得到如下线性关系

$$-\ln(-\ln P) = \frac{y-u_0}{\beta_0} \quad (16)$$

将每个多晶微结构的体积平均  $FIP$  的极大值数据点按式 (16) 进行拟合, 可获得疲劳分散性结果.

## 2 增材制造微结构演化

采用 1.1 节中的热-熔体-微结构耦合的非等温

相场模型, 对选区激光熔化增材制造的微结构演化进行了详细计算研究, 激光功率  $P_0$  固定为 400 W, 激光扫描速度  $v$  设为 0.5, 1.0, 1.5, 2.0 m/s, 选取金属材料为 316L 不锈钢. 非等温相场模拟在二维区域内进行, 316L 不锈钢粉床  $x$  方向长度为 600 μm, 粉末颗粒的平均粒径约为 28 μm, 第一层粉末厚约为 100 μm, 后续逐层铺粉的粉末层厚约为 40 μm, 二维区域的底部假设为稳态导热换热的基板, 其余边界均允许对流散热, 基板、预热以及环境温度均设置为 680 K.

图 2 给出了激光扫描速度  $v = 2$  m/s 下 316L 不锈钢粉末逐层选区激光熔化过程的典型微观结构演化, 其中可直接观察到熔池中的熔体流动以及气孔的运动. 粉末颗粒首先在激光辐照下发生快速熔化, 形成流动的熔池, 在重力作用下, 初始颗粒表面高低不平所形成的凸起熔体会向下流动, 引发表面和气孔附近的平展流. 颗粒间的间隙也以气孔的形式出现在熔池中, 成为增材制造微结构中孔隙的重要来源.

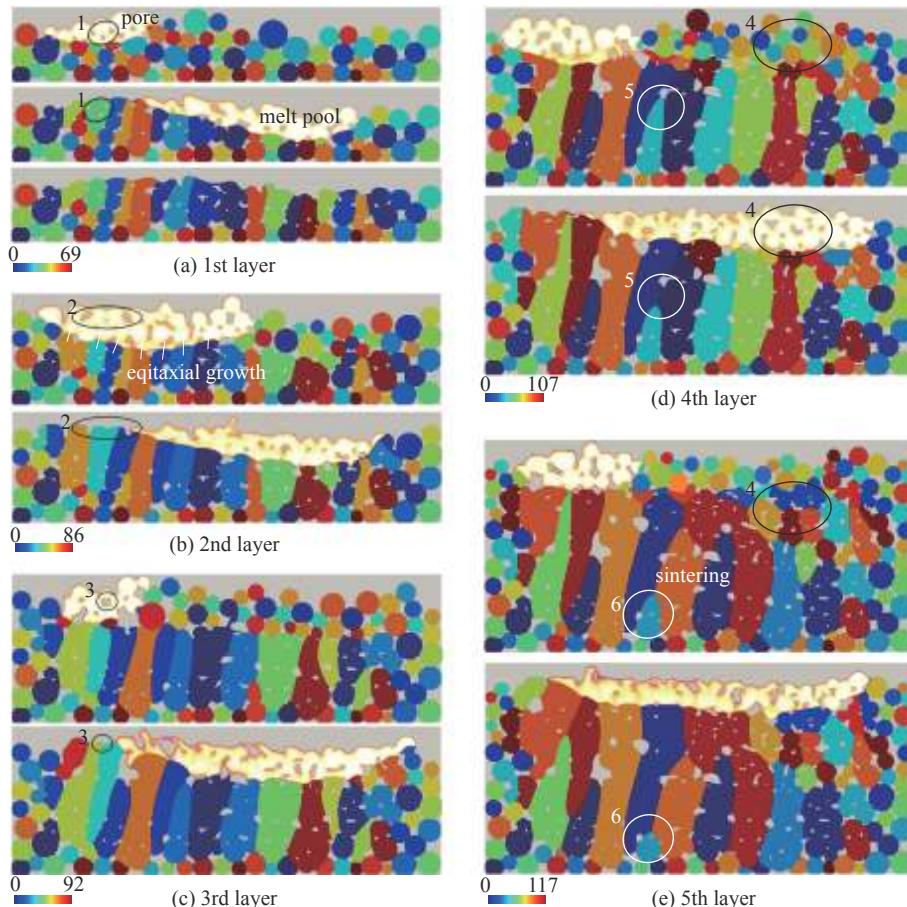


图 2 逐层选区激光熔化增材制造过程的微结构演化 ( $v = 2$  m/s)

Fig. 2 Microstructure evolution during layer-by-layer selective laser melting ( $v = 2$  m/s)

源, 如图 2(d) 和图 2(e) 中的圆圈 4 所示。当熔体凝固而气孔尚未来不及从熔体表面逃逸出去时, 气孔会残留在微结构内部, 形成明显的孔洞缺陷, 如图 2(a) 的圆圈 1 和图 2(e) 的圆圈 4 所示。若在熔体凝固前, 气孔能运动至熔体表面并逃逸出去, 则气孔不会在微结构内形成孔洞缺陷, 如图 2(b) 和图 2(c) 的圆圈 3 所示。计算结果表明, 当激光扫描速度较大时, 熔池存在时间短且凝固发生快, 导致气孔难以逸出, 形成较多孔洞缺陷。熔池的凝固伴随着晶体外延生长, 以减小晶界能, 如图 2(b) 中的箭头所示。已凝固晶粒受到后续激光扫描的热影响, 会发生烧结现象, 晶粒粗化, 如图 2(d) 的圆圈 5 和图 2(e) 的圆圈 6 所示。因此, 本文的非等温相场模型能够模拟增材制造中包括熔化、凝固、晶粒生长/粗化、熔池流动、气孔运动、晶界迁移和孔洞生成等在内的微结构演化全过程。

选区激光熔化五层粉末所获得的最终微结构如图 3(a)~图 3(d) 所示。容易看出, 当激光扫描速度从 2 m/s 降至 0.5 m/s 时, 孔洞缺陷和晶粒数量显著减少, 在发生完全熔化的中间区域部分, 形成了明显的柱状晶结构。对中间长 400 μm、高 190 μm 的区域进行孔隙率计算(图 3(e)), 发现 2 m/s 和 1 m/s 的激光扫描速度分别产生 6.3% 和 0.52% 的孔隙率, 而 0.5 m/s 的激光扫描速度可形成无孔隙的完美柱状晶微结构。文献报道的选区激光熔化 316L 不锈钢的孔隙率实验结果表明, 功率 90 W 和扫描速度 1 m/s 得到的孔隙率约 2.3%<sup>[44]</sup>, 而功率 160 W 和扫描速度 1.2 m/s 得到的孔隙率为 2%~3.8%<sup>[45]</sup>, 因此本文计算的孔隙率数值在实验结果范围之内。

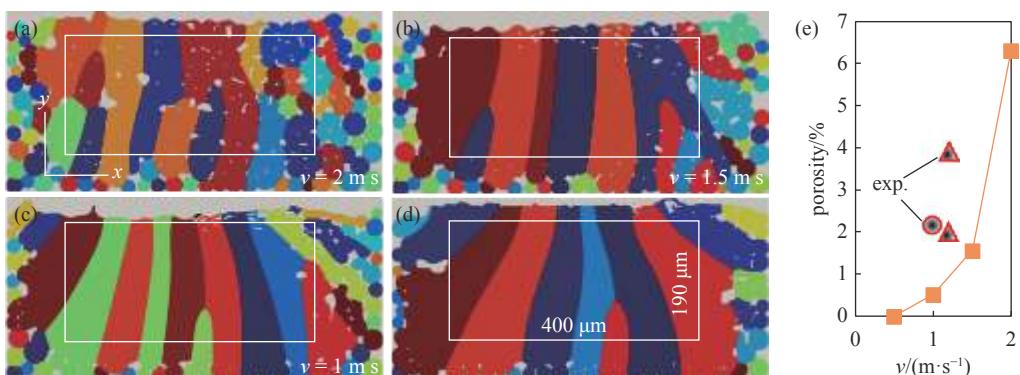


图 3 选区激光熔化增材制造微结构及其孔隙率: (a)  $v = 2 \text{ m/s}$ ; (b)  $v = 1.5 \text{ m/s}$ ; (c)  $v = 1 \text{ m/s}$ ; (d)  $v = 0.5 \text{ m/s}$ ; (e) 图 (a)~图 (d) 中矩形区域( $400 \mu\text{m} \times 190 \mu\text{m}$ )的孔隙率, 其中圆形( $90 \text{ W}, 1 \text{ m/s}$ )<sup>[44]</sup>和三角形( $160 \text{ W}, 1.2 \text{ m/s}$ )<sup>[45]</sup>标记为实验结果

Fig. 3 Microstructure and porosity obtained by selective laser melting: (a)  $v = 2 \text{ m/s}$ ; (b)  $v = 1.5 \text{ m/s}$ ; (c)  $v = 1 \text{ m/s}$ ; (d)  $v = 0.5 \text{ m/s}$ ; (e) porosity of the rectangular region ( $400 \mu\text{m} \times 190 \mu\text{m}$ ) in (a)-(d), with the circle ( $90 \text{ W}, 1 \text{ m/s}$ )<sup>[44]</sup> and triangle ( $160 \text{ W}, 1.2 \text{ m/s}$ )<sup>[45]</sup> markers indicating the experimental results

### 3 增材制造微结构力学性能及疲劳分散性

为了评定增材制造微结构的力学性能, 采用晶体塑性有限元对图 3(a)~图 3(d) 中  $400 \mu\text{m} \times 190 \mu\text{m}$  的矩形区域进行了沿  $x$  和  $y$  方向的平面应变拉伸模拟。增材制造模拟中存在明显的晶粒外延生长行为, 故第一层粉床凝固形成的晶粒的取向, 对整个微结构的晶粒取向分布影响甚大。本文考虑第一层凝固生成晶粒的取向存在随机性, 将微结构中所有晶粒取向按均匀分布来设置, 共设 30 组分布, 也即每个微结构的力学行为计算 30 次, 统计平均后的计算结果如图 4 所示。可以看出, 应力-应变曲线(图 4(a))和屈服强度(图 4(b))呈现明显的各向异性。当激光

扫描速度较低( $v = 0.5 \sim 1.5 \text{ m/s}$ )时,  $y$  方向的杨氏模量和屈服强度明显大于  $x$  方向的, 这是因为此时孔隙率较低, 沿  $y$  方向的柱状晶形貌成为各向异性的主要控制因素。当激光扫描速度较高( $v = 2 \text{ m/s}$ )时,  $y$  方向和  $x$  方向的应力-应变曲线和屈服强度差别不大, 且屈服强度的分散性也小, 这是因为此时孔隙率较高,  $y$  方向柱状晶不连续, 决定微结构力学行为的主要因素是孔隙的应力集中, 晶向分布是次要影响因素。文献实验报道的选区激光熔化 316L 不锈钢的屈服强度存在较大分散性, 比如 Ahmadi 等<sup>[25]</sup>采用功率  $129 \sim 144 \text{ W}$  和扫描速度  $1.4 \sim 1.54 \text{ m/s}$  得到的屈服强度为  $219 \sim 373 \text{ MPa}$ , 而 Kumar 等<sup>[44]</sup>采用功率  $90 \text{ W}$  和扫描速度  $1 \text{ m/s}$  得到的屈服强度高

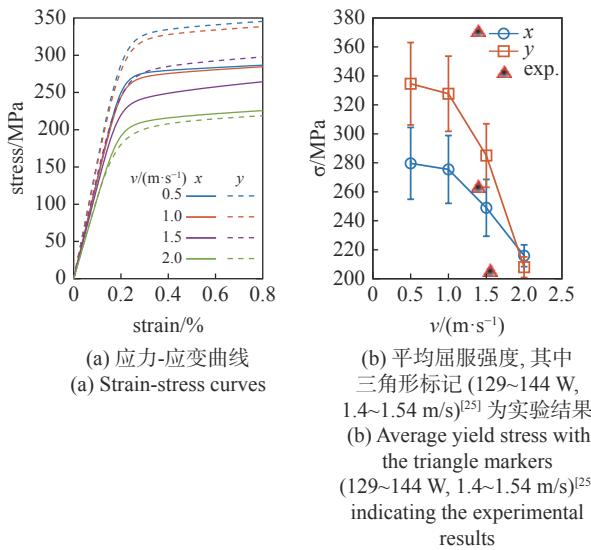


图4 选区激光熔化增材制造微结构力学性能

Fig. 4 Mechanical property of microstructure from selective laser melting

达430~511 MPa。Shrestha等<sup>[46]</sup>采用功率350 W和扫描速度1 m/s得到的屈服强度为495~545 MPa。本文计算的屈服强度低于文献实验值,其原因可能与晶粒尺寸和晶体塑性模型参数相关。文献实验得到的晶粒尺寸为1 μm<sup>[44]</sup>和28~33 μm<sup>[46]</sup>,远小于本文得到的晶粒尺寸,故本文的相场模型及参数有待进一步改进。

为了计算FIP,首先计算了不同应变幅下微结构的循环应力-应变曲线,应变比为-1,计算前3个循环。结果如图5所示,当应变幅为0.12%时,微结构中没有产生宏观塑性变形,平均应力-应变曲线仍处于弹性阶段,与高周疲劳的载荷特征相似。当应变幅为0.2%时,单调拉伸产生的宏观塑性应变为0.015%~0.03%,部分晶粒进入屈服阶段,形成了宏观塑性应变,循环载荷曲线上出现了较小的加工硬化,已经超出了高周疲劳的载荷范畴。此外,在相同应变幅下,v=0.5 m/s和v=1.5 m/s对应的循环曲线差别不大,且承受的最大应力远大于v=2 m/s的情况,这与前述分析的微结构特点紧密相关。

图6给出了每个有限元网格FIP最大值的分布,可以发现当应变幅从0.06%增加至0.12%时,FIP最大值增加了一个数量级。当应变幅为0.06%时(图6(a)),大部分区域的FIP值在 $1 \times 10^{-6}$ 以下,仅孔洞边缘的FIP大于 $1 \times 10^{-4}$ ;当应变幅为0.12%时(图6(b)),少量晶粒内部的FIP值大于 $10^{-4}$ ,孔洞边缘的FIP达到 $1 \times 10^{-2}$ ;当应变幅为

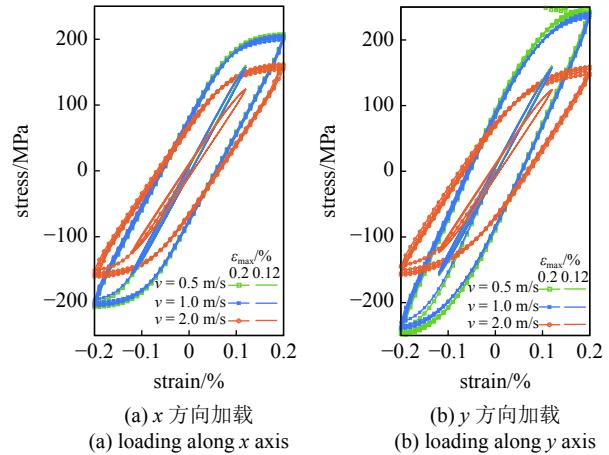
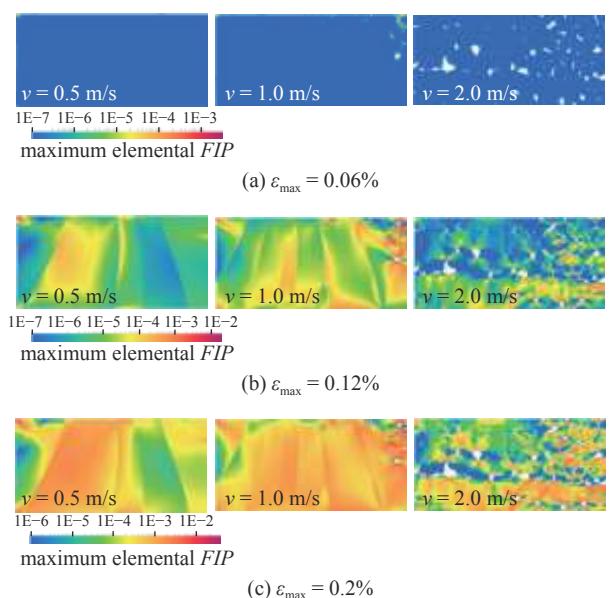
图5 不同应变幅( $\epsilon_{\max}$ )下选区激光熔化增材制造微结构的循环应力-应变曲线

Fig. 5 Macroscopic stress-strain cyclic response of microstructure from selective laser melting

0.2%时(图6(c)),大量晶粒内部的FIP值大于 $1 \times 10^{-4}$ ,孔洞边缘的FIP达到 $3 \times 10^{-2}$ 。疲劳裂纹最有可能在较高FIP的部位萌生,因此在应变幅较大且孔洞缺陷较多的情况下,疲劳裂纹萌生的驱动力也越大,相应的疲劳寿命也会降低。

为了分析微结构疲劳性能的分散性,需对表征疲劳裂纹萌生驱动力的FIP极值进行统计分析。与前述类似,每种应变幅和激光扫描速度的情形均计算30组多晶微结构( $N=30$ ),每组计算的最大FIP的极值概率分布如图7所示。当应变幅为0.06%和激光扫描速度为0.5 m/s时,FIP极值与Gumbel

图6 x方向不同应变幅( $\epsilon_{\max}$ )下单元FIP分布Fig. 6 Variation of elemental FIPs throughout the sample under different strain magnitude ( $\epsilon_{\max}$ ) along x axis

分布的匹配系数低于 0.85。这是因为, 在低应变幅和无孔洞缺陷条件下, 发生滑移的晶粒具有特殊尺寸、取向以及相邻晶粒环境, 且出现相同或相近极值行为的晶粒组合的概率很低, 导致 FIP 极值分散性高、量级跨度大<sup>[47]</sup>。比如  $x$  和  $y$  方向加载时的 FIP 极值所在区间分别约为  $[4 \times 10^{-8}, 4 \times 10^{-5}]$  和  $[2 \times 10^{-7}, 2 \times 10^{-5}]$ , 跨度超过 2~3 个量级。

随着应变幅增大和激光扫描速度增加(也即孔洞缺陷增多), Gumbel 分布的匹配度不断上升, FIP 极值分散性降低、量级跨度减小。比如当应变幅增大到 0.12% 时, FIP 极值所在区间的跨度下降至 1 个量级; 当应变幅继续增大到 0.2% 时, FIP 极值分散度处于同一量级。而在同一应变幅下, 不同激光扫描速度下的 FIP 极值所在区间跨度的量级相近, 但 FIP 极值分布随着激光扫描速度的增加而往右移动, 也即 FIP 极值有所升高, 裂纹萌生驱动力增大, 疲劳寿命降低。因此, 应变幅是 FIP 极值区间跨度量级的主要决定因素, 而激光扫描速度是 FIP 极值大小的主要决定因素。

对比图 7(a) 和图 7(b) 可以看出,  $x$  和  $y$  方向加载时的 FIP 极值分散性相近, 但  $y$  方向加载时的 FIP 极值分布明显更为靠右, 也即 FIP 极值更大。为了综合评估图 7 呈现的 FIP 分散性, 图 8 给出了拟合 Gumbel 分布得到的相对分散性参数  $\beta_0/u_0$  随应变

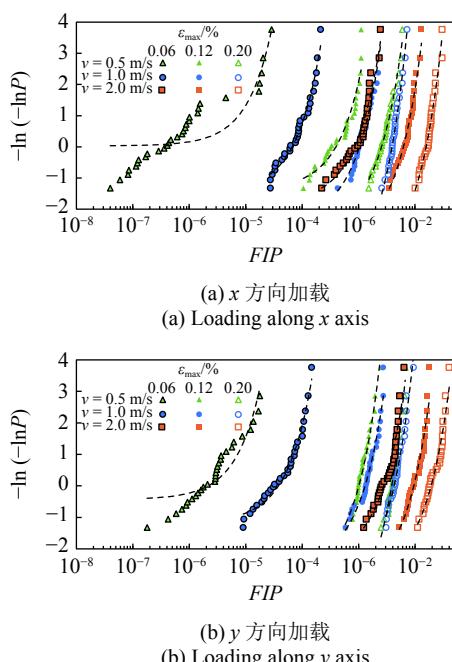


图 7 体积平均 FIP 极值概率分布及其 Gumbel 函数拟合

Fig. 7 Extreme value distributions of the volume averaged FIPs and their fit to the Gumbel distribution

幅和激光扫描速度的变化曲线。可以看出, 应变幅值的增大使得 FIP 相对分散性下降, 较高激光扫描速度产生较多孔洞缺陷, 进而降低 FIP 相对分散性, 以及疲劳裂纹萌生对微结构的敏感性。相对分散性参数在应变幅小于 0.12% 时的变化要明显大于应变幅超过 0.12% 的情况。当应变幅超过 0.2% 时, 多晶微结构发生宏观塑性变形, 向低周疲劳范畴转变, 呈现低分散性特征。同时, FIP 极值升高, 对应更大的疲劳裂纹萌生驱动力和普遍更短的疲劳寿命。

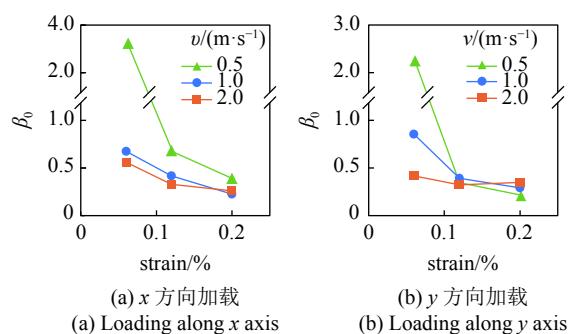


图 8 相对分散性参数 ( $\beta_0/u_0$ ) 变化曲线  
Fig. 8 Relative dispersion parameter ( $\beta_0/u_0$ ) curves

## 4 结论

(1) 集成离散元、非等温相场模拟、晶体塑性有限元和极值概率分析方法, 实现了增材制造中包括熔化、凝固、晶粒生长/粗化、熔池流动、气孔运动、孔洞生成等在内的微结构演化全过程的计算, 以及增材制造工艺参数对微结构力学性和疲劳分散性影响的计算。

(2) 增材制造微结构的宏观屈服强度  $\sigma_y$  随激光扫描速度的增加而降低, 当激光扫描速度不大且微结构孔隙率不高时,  $\sigma_y$  呈现各向异性, 柱状晶生长方向的  $\sigma_y$  明显高于垂直该方向的  $\sigma_y$ ; 当激光扫描速度较高且孔洞缺陷较多时,  $\sigma_y$  近乎各向同性。

(3) 增材制造微结构在弹性应变幅范围内的 FIP 极值区间跨越 1~3 个量级, FIP 分散性较大, 因而疲劳裂纹萌生对增材制造微结构更敏感, 疲劳寿命分散性也越大; 增加激光扫描速度可减小 FIP 相对分散性参数, 进而降低增材制造微结构疲劳分散性, 但会导致 FIP 极值升高, 对应增材制造微结构中更大的疲劳裂纹萌生驱动力和更短的疲劳寿命。

## 参 考 文 献

1 卢秉恒. 增材制造技术-现状与未来. 中国机械工程, 2020, 31(1):

- 19-23 (Lu Bingheng. Additive manufacturing-current situation and future. *China Mechanical Engineering*, 2020, 31(1): 19-23 (in Chinese))
- 2 王华明. 高性能大型金属构件激光增材制造: 若干材料基础问题. *航空学报*, 2014, 35(10): 2690-2698 (Wang Huaming. Materials' fundamental issues of laser additive manufacturing for high-performance large metallic components. *Acta Aeronautica ET Astronautica Sinica*, 2014, 35(10): 2690-2698 (in Chinese))
- 3 顾冬冬, 张红梅, 陈洪宇等. 航空航天高性能金属材料构件激光增材制造. *中国激光*, 2020, 47(5): 0500002 (Gu Dongdong, Zhang Hongmei, Chen Hongyu, et al. Laser Additive manufacturing of high-performance metallic aerospace components. *Chinese Journal of Lasers*, 2020, 47(5): 0500002 (in Chinese))
- 4 陈嘉伟, 熊飞宇, 黄辰阳等. 金属增材制造数值模拟. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2020, 50(9): 090007 (Chen Jiawei, Xiong Feiyu, Huang Chenyang, et al. Numerical simulation on metallic additive manufacturing. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, 2020, 50(9): 090007 (in Chinese))
- 5 王超, 徐斌, 段尊义等. 面向增材制造的应力最小化连通性拓扑优化. *力学学报*, 2021, 53(4): 1070-1080 (Wang Chao, Xu Bin, Duan Zunyi, et al. Additive manufacturing-oriented stress minimization topology optimization with connectivity. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(4): 1070-1080 (in Chinese))
- 6 秋大闯, 李多生, 叶寅等. SLM 成形镍基高温合金及其数值模拟的研究进展. *功能材料*, 2019, 50(03): 03049-03058 (Qiu Dachuang, Li Duosheng, Ye Yin, et al. Research progress of SLM forming nickel-based superalloys and the simulation. *Journal of Functional Materials*, 2019, 50(03): 03049-03058 (in Chinese))
- 7 张江涛, 谭援强, 纪财源等. 增材制造中滚筒铺粉工艺参数对尼龙粉体铺展性的影响研究. *力学学报*, 2021, 53(9): 2418-2428 (Zhang Jiangtao, Tan Yuanqiang, Ji Caiyuan, et al. Research on the effects of roller-spreading parameters for nylon powder spreadability in additive manufacturing. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(9): 2418-2428 (in Chinese))
- 8 Sahoo S, Chou K. Phase-field simulation of microstructure evolution of Ti-6Al-4V in electron beam additive manufacturing process. *Additive Manufacturing*, 2016, 9: 14-24
- 9 Liu PW, Ji YZ, Wang Z, et al. Investigation on evolution mechanisms of site-specific grain structures during metal additive manufacturing. *Journal of Materials Processing Technology*, 2018, 257: 191-202
- 10 Yang M, Wang L, Yan WT. Phase-field modeling of grain evolutions in additive manufacturing from nucleation, growth, to coarsening. *NPJ Computational Materials*, 2021, 7: 56
- 11 Lu LX, Sridhar N, Zhang YW. Phase field simulation of powder bed-based additive manufacturing. *Acta Materialia*, 2018, 144: 801-809
- 12 Yang Y, Ragnvaldsen O, Bai Y, et al. 3D non-isothermal phase-field simulation of microstructure evolution during selective laser sintering. *NPJ Computational Materials*, 2019, 5: 81
- 13 Yang Y, Kühn P, Yi M, et al. Non-isothermal phase-field modeling of heat-melt-microstructure-coupled processes during powder bed fusion. *JOM*, 2020, 72(4): 1719-1733
- 14 Yang Y, Oyedele TD, Kühn P, et al. Investigation on temperature-gradient-driven effects in unconventional sintering via non-isothermal phase-field simulation. *Script Materialia*, 2020, 186: 152-157
- 15 Yang Y, Doñate-Buendía C, Oyedele TD, et al. Nanoparticle tracing during laser powder bed fusion of oxide dispersion strengthened steels. *Materials*, 2021, 14(13): 3463
- 16 杨阳祎玮, 易敏, 胥柏香. 粉末增材制造微结构的非等温相场模拟. *中南大学学报*, 2020, 51(11): 3019-3031 (Yang Yangyiwei, Yi Min, Xu Baixiang. Non-isothermal phase-field simulation of microstructure in powder-based additive manufacturing. *Journal of Central South University*, 2020, 51(11): 3019-3031 (in Chinese))
- 17 Lian YP, Lin S, Yan WT, et al. A parallelized three-dimensional cellular automaton model for grain growth during additive manufacturing. *Computational Mechanics*, 2018, 61(5): 543-558
- 18 Lian YP, Gan Z, Yu C, et al. A cellular automaton finite volume method for microstructure evolution during additive manufacturing. *Materials Design*, 2019, 169: 107672
- 19 魏雷, 林鑫, 王猛等. 激光立体成形中熔池凝固微观组织的元胞自动机模拟. *物理学报*, 2015, 64(1): 018103 (Wei Lei, Lin Xin, Wang Meng, et al. Cellular automaton simulation of the molten pool of laser solid forming process. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(1): 018103 (in Chinese))
- 20 Yan WT, Lian YP, Yu C, et al. An integrated process-structure-property modeling framework for additive manufacturing. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 339: 184-204
- 21 Rai A, Markl M, Körner C. A coupled cellular automaton-lattice Boltzmann model for grain structure simulation during additive manufacturing. *Computational Materials Science*, 2016, 124: 37-48
- 22 Rai A, Helmer H, Körner C. Simulation of grain structure evolution during powder bed based additive manufacturing. *Additive Manufacturing*, 2017, 13: 124-134
- 23 Wang Z, Yan W, Liu WK, et al. Powder-scale multi-physics modeling of multi-layer multi-track selective laser melting with sharp interface capturing method. *Computational Mechanics*, 2019, 63(4): 649-661
- 24 King W, Anderson AT, Ferencz RM, et al. Overview of modelling and simulation of metal powder bed fusion process at Lawrence Livermore National Laboratory. *Materials Science and Technology*, 2015, 31(8): 957-968
- 25 Ahmadi A, Mirzaei A, Moghaddam NS, et al. Effect of manufacturing parameters on mechanical properties of 316L stainless steel parts fabricated by selective laser melting: a computational framework. *Materials Design*, 2016, 112: 328-338
- 26 张昭, 葛芃, 谭治军等. 激光增材制造微观结构模拟与力学性能预测. *兵器材料科学与工程*, 2018, 41(1): 1-7 (Zhang Zhao, Ge Peng, Tan Zhijun, et al. Numerical simulation of microstructural evolutions and prediction of mechanical properties in laser additive manufacturing. *Ordnance Material Science and Engineering*, 2018, 41(1): 1-7 (in Chinese))
- 27 Liu PW, Wang Z, Xiao YH, et al. Integration of phase-field model and crystal plasticity for the prediction of process-structure-property relation of additively manufactured metallic materials. *International Journal of Plasticity*, 2020, 128: 102670
- 28 DebRoy T, Wei HL, Zuback JS, et al. Additive manufacturing of metallic components—process, structure and properties. *Progress in Materials Science*, 2018, 92: 112-224
- 29 Smith J, Xiong W, Yan W, et al. Linking process, structure, property, and performance for metal-based additive manufacturing: computational approaches with experimental support. *Computational Mechanics*, 2016, 57: 583-610

- 30 Kozicki J, Donze FV. YADE-OPEN DEM: an opensource software using a discrete element method to simulate granular material. *Engineering Computations*, 2009, 26(7): 786-805
- 31 Tonks MR, Gaston D, Millett PC, et al. An object-oriented finite element framework for multiphysics phase field simulations. *Computational Materials Science*, 2012, 51(1): 20-29
- 32 Huang Y. A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program. Mech. Report 178. Division of Engineering and Applied Sciences, Harvard University, Cambridge, Massachusetts, 1991
- 33 Fatemi A, Socie DF. A critical plane approach to multiaxial fatigue damage including out-of-phase loading. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 1988, 11(3): 149-165
- 34 McDowell L, Berard JY. A  $\Delta J$ -based approach to biaxial fatigue. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 1992, 15(8): 719-741
- 35 Castelluccio GM, McDowell DL. Assessment of small fatigue crack growth driving forces in single crystals with and without slip bands. *International Journal of Fracture*, 2012, 176(1): 49-64
- 36 Castelluccio GM, McDowell DL. Effect of annealing twins on crack initiation under high cycle fatigue conditions. *Journal of Materials Science*, 2013, 48(6): 2376-2387
- 37 Gu T, Stopka KS, Xu C, et al. Prediction of maximum fatigue indicator parameters for duplex Ti-6Al-4V using extreme value theory. *Acta Materialia*, 2020, 188: 504-516
- 38 Stopka KS, Gu T, McDowell DL. Effects of algorithmic simulation parameters on the prediction of extreme value fatigue indicator parameters in duplex Ti-6Al-4V. *International Journal of Fatigue*, 2020, 141: 105865
- 39 Musinski WD, McDowell DL. Simulating the effect of grain boundaries on microstructurally small fatigue crack growth from a focused ion beam notch through a three-dimensional array of grains. *Acta Materialia*, 2016, 112: 20-39
- 40 Stopka KS, McDowell DL. Microstructure-sensitive computational multiaxial fatigue of Al 7075-T6 and duplex Ti-6Al-4V. *International Journal of Fatigue*, 2020, 133: 105460
- 41 Stopka KS, McDowell DL. Microstructure-sensitive computational estimates of driving forces for surface versus subsurface fatigue crack formation in duplex Ti-6Al-4V and Al 7075-T6. *JOM*, 2020, 72(1): 28-38
- 42 Miller KJ. The behaviour of short fatigue cracks and their initiation part I-a review of two recent books. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 1987, 10(1): 75-91
- 43 Jan B, Goegebeur Y, Teugels J, et al. Statistics of Extremes: Theory and Applications. John Wiley & Sons, Ltd. 2004
- 44 Kumar P, Jayaraj R, Suryawanshi T, et al. Fatigue strength of additively manufactured 316L austenitic stainless steel. *Acta Materialia*, 2020, 199: 225-239
- 45 Obeidi MA, UfMhurchadha SM, Raghavendra R, et al. Comparison of the porosity and mechanical performance of 316L stainless steel manufactured on different laser powder bed fusion metal additive manufacturing machines. *Journal of Materials Research and Technology*, 2021, 13: 2361-2374
- 46 Shrestha R, Simsiriwong J, Shamsaei N. Fatigue behavior of additive manufactured 316L stainless steel parts: Effects of layer orientation and surface roughness. *Additive Manufacturing*, 2019, 28: 23-38
- 47 韩世伟, 石多奇, 杨晓光等. 微结构相关的高循环疲劳分散性计算方法研究. *金属学报*, 2016, 52(3): 289-297 (Han Shiwei, Shi Duoqi, Yang Xiaoguang, et al. Computational study on microstructure-sensitive high cycle fatigue dispersivity. *Acta Metallurgica Sinica*, 2016, 52(3): 289-297 (in Chinese))