

El、Scopus 收录 中文核心期刊

## 金属增材制造晶体塑性有限胞元自治聚类分析方法

于 飞,廉艳平,李明健,高汝鑫

CRYSTAL PLASTICITY FINITE CELL SELF-CONSISTENT CLUSTERING ANALYSIS METHOD FOR METAL ADDITIVE MANUFACTURING

Yu Fei, Lian Yanping, Li Mingjian, and Gao Ruxin

在线阅读 View online: https://doi.org/10.6052/0459-1879-23-624

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

# 增材制造微结构演化及疲劳分散性计算

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

力学学报. 2021, 53(12): 3263-3273

增材制造316钢高周疲劳性能的微观力学研究

MICROMECHANICAL STUDY OF THE HIGH CYCLE FATIGUE PROPERTY OF ADDITIVE-MANUFACTURED 316 STEEL 力学 报. 2021, 53(12): 3181-3189

# 金属增材制造中的缺陷、组织形貌和成形材料力学性能

DEFECTS, MICROSTRUCTURES AND MECHANICAL PROPERTIES OF MATERIALS FABRICATED BY METAL ADDITIVE MANUFACTURING

力学学报. 2021, 53(12): 3190-3205

# 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

# 面向增材制造的熔池凝固组织演变的相场研究

PHASE–FIELD STUDY ON THE EVOLUTION OF MICROSTRUCTURE OF THE MOLTEN POOL FOR ADDITIVE MANUFACTURING

力学学报. 2021, 53(12): 3252-3262



关注微信公众号,获得更多资讯信息

2024 年 7 月

Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics

数据驱动的结构分析与设计专题

# 金属增材制造晶体塑性有限胞元自洽聚类分析方法"

于 飞\* 廉艳平\*,<sup>†,2</sup>) 李明健\* 高汝鑫\*

\*(北京理工大学先进结构技术研究院,北京100081) \*(北京理工大学轻量化多功能复合材料与结构北京市重点实验室,北京100081)

**摘要** 金属增材制造是一种先进的数字化制造技术,在高性能及复杂构件快速制备方面具有独特的优势.然而, 其成形材料微观组织复杂且存在不可避免的制造缺陷,导致实际制造材料性能与设计性能存在偏差,亟需发展 考虑真实材料微观组织和缺陷的力学性能高效预测方法.针对该问题,发展了晶体塑性有限胞元-自洽聚类分析 方法,包括离线数据准备和在线快速计算两个阶段.其中,在离线阶段,采用晶体塑性有限胞元法和聚类算法建 立实际微观组织代表体元离散数据;在线阶段,采用基于加权余量-子域法的自洽聚类分析和考虑 Hall-Petch 效 应的晶体塑性模型求解了代表体元问题的 Lippmann-Schwinger 方程,进而通过应力应变均匀化获得材料的宏 观等效力学性能.通过理想及含不规则孔隙的多晶算例验证了所提出方法的计算精度及高效性;进一步,采用 该方法研究了激光选区熔融增材制造 IN625 合金力学性能,并揭示了工艺参数对其力学性能的影响.结果表明, 文章工作为金属增材制造成形材料力学性能预测提供了一种高效的计算方法.

关键词 数据驱动方法, 自洽聚类分析, 晶体塑性, 有限胞元, 增材制造

中图分类号: O63 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-23-624

# CRYSTAL PLASTICITY FINITE CELL SELF-CONSISTENT CLUSTERING ANALYSIS METHOD FOR METAL ADDITIVE MANUFACTURING<sup>1)</sup>

Yu Fei \* Lian Yanping \*, <sup>†</sup>, <sup>2</sup>) Li Mingjian \* Gao Ruxin \*

\* (Institute of Advanced Structure Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)
 <sup>†</sup> (Beijing Key Laboratory of Lightweight Multi-Functional Composite Materials and Structures, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

**Abstract** Metal additive manufacturing (AM) is an advanced digital manufacturing technology with distinctive advantages in the rapid fabrication of intricate and high-performance parts. However, there are deviations between the mechanical properties of the as-built material and their intended design counterparts due to the complex microstructure of the fabricated material and the inevitable defects that occur during the manufacturing process. To accurately predict the material properties, employing an efficient numerical method that considers the actual microstructural features is crucial. In this study, a crystal plasticity finite cell-self-consistent clustering analysis (CPFC-SCA) method is proposed. It consists of two distinct calculation stages: an offline stage for data preparation and an online stage for rapid calculations. During the offline stage, the CPFC and a clustering method are integrated to discretize the representative volume element (RVE)

1) 国家自然科学基金 (11972086) 和中央高校基本科研业务费专项资金资助项目.

2) 通讯作者: 廉艳平, 教授, 主要研究方向为极端多场计算力学. E-mail: yanping.lian@bit.edu.cn

引用格式:于飞,廉艳平,李明健,高汝鑫.金属增材制造晶体塑性有限胞元自治聚类分析方法.力学学报,2024,56(7):1916-1930

Yu Fei, Lian Yanping, Li Mingjian, Gao Ruxin. Crystal plasticity finite cell self-consistent clustering analysis method for metal additive manufacturing. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2024, 56(7): 1916-1930

<sup>2023-12-26</sup> 收稿, 2024-03-14 录用, 2024-03-15 网络版发表.

of the as-built material microstructure. Subsequently, during the online stage, the SCA derived from the subdomain weighted residual formulation and crystal plasticity involving the Hall-Patch effect are utilized to solve the Lippmann-Schwinger equation of the RVE, and the numerical results are further utilized to determine the effective mechanical properties through the homogenization of stress and strain. Several numerical examples, RVEs with and without the irregular void, are presented to showcase the accuracy and efficiency of the proposed method. Furthermore, we applied the proposed method to numerically address the as-built mechanical properties of additively manufactured IN625 using selective laser melting, and the numerical results shed light on the relationship between the process parameters and the mechanical properties. It is demonstrated that the proposed method is a promising numerical simulation tool with high efficiency in predicting the mechanical properties of materials fabricated by metal additive manufacturing.

**Key words** data-driven method, self-consistent clustering analysis, crystal plasticity, finite cell method, additive manufacturing

# 引 言

金属增材制造 (additive manufacturing, AM, 又称 3D 打印) 技术采用激光、电子束和电弧等高能 热源将金属粉末或金属丝熔融, 按照逐层逐道 堆积的方式实现构件的快速制造,被誉为一种低成 本、短周期和设计制造一体化的变革性制造技术<sup>[1-2]</sup>. 该技术在制造形状复杂、材料昂贵的金属零部件和 小批量定制生产方面具有独特的优势, 因而在航 空、航天、核电和医疗等领域有巨大的应用空间和 发展前景<sup>[3-4]</sup>. 然而, AM 成形材料具有晶粒形貌和 空间分布复杂的微观组织以及难以避免的孔隙等工 艺缺陷<sup>[5-6]</sup>, 导致其实际成形材料性能与设计性能存 在偏差且不易控制. 因此, 亟待对实际制造材料"微 观组织-力学性能"关系这一核心科学问题开展深入 系统的研究<sup>[7]</sup>.

金属增材制造过程涉及强非线性多尺度多物理 场耦合问题<sup>[8-9]</sup>,材料凝固微观组织与成形过程工艺 参数密切相关,进而导致材料力学性能迥异<sup>[10-11]</sup>.数 值模拟是研究上述问题的一种重要且有效的手段<sup>[12-13]</sup>. 针对不同工艺参数下成形材料力学性能预测问题, 亟需发展能够考虑真实材料微观组织的高效数值模 拟方法.

目前考虑材料微观组织的力学性能预测方法主要包括直接数值模拟方法和数据驱动方法.两类算法通常取材料的代表体元 (representative volume elemet, RVE) 进行分析,以预测其宏观等效力学性能.其中,直接数值模拟方法主要包括晶体塑性有限元法 (crystal plasticity finite element method, CPFEM) 和晶体塑性快速傅里叶变换法 (crystal plasticity fast Fourier transform, CPFFT). CPFEM 可处理

具有复杂几何形状问题<sup>[14]</sup>. Zhang 等<sup>[15]</sup> 采用 CPFEM 模拟了 13Cr4NiMo 高强钢拉伸过程中形变诱导马 氏体的转变和微观力学行为;朱继宏等[16]应用 CPFEM 分析了增材制造 316L 不锈钢高周疲劳性能; 易敏等[17] 采用 CPFEM 预测了激光选区熔融增材制造 316L 不锈钢多晶材料的宏观力学响应及其与工艺参数的 关联. 然而, CPFEM 采用随体网格离散求解时, 在相 对边界面上离散时受限于周期性边界条件 (periodic boundary condition, PBC) 的网格匹配约束, 并且处理 具有复杂几何内部缺陷 RVE 时存在高质量网格离 散困难,若采用体素网格则存在离散规模大、计算 耗时的挑战.相比于 CPFEM, CPFFT 只能采用规则化 网格, 宜于处理具有规则形状的 RVE 问题. Lebensohn 等[18] 应用 CPFFT 分析了铜多晶材料中的微观变形 机制,分析了非各向同性弹塑性行为; Eghtesad 等<sup>[19]</sup> 采用 CPFFT 并结合位错硬化模型研究了不同晶粒 尺寸下的多晶镍材料力学行为. 虽然 CPFFT 计算效 率高于 CPFEM, 但是前者需要 RVE 所包含的微观 组织满足周期性空间分布.数据驱动方法主要以自 治聚类分析方法 (self-consistent clustering analysis, SCA)<sup>[20]</sup>为代表. 该算法主要针对复合材料力学性能 分析,目前在金属增材制造成形材料力学性能分析 上有初步的应用<sup>[21-22]</sup>. SCA 分离线和在线两个阶段 计算,其数据驱动属性主要体现在离线阶段的聚类 划分.为此, SCA 通常采用 FEM 进行 RVE 的线弹性 高保真计算以获得高斯点应变集中张量,进一步通 过机器学习聚类算法对单元高斯点进行聚类离散. 相对于另外两种算法, SCA 在保证计算精度的同时, 具有较高的计算效率. 然而, 其离线计算也面临 CPFEM 的同样局限.

力

综上, 针对考虑微观组织的成形构件力学性能 预测问题和已有算法存在的局限性, 本文发展了晶 体塑性有限胞元-自洽聚类分析方法. 其中有限胞元 法 (finite cell method, FCM) 是一种嵌入域算法<sup>[23-24]</sup>, 避免了由结构复杂几何形状或几何特征 (例如孔隙 和夹杂等) 引起的网格划分困难. 将有限胞元法与自 洽聚类分析方法相结合, 解决离线阶段耗时且容易 出错的边界匹配网格的生成需求; 结合晶体塑性本 构, 考虑真实材料微观组织所决定的材料宏观力学 性能. 通过一系列数值算例验证了该方法的计算精 度和高效性, 进而基于该方法研究了选区激光熔融 (selective laser melting, SLM) 增材制造 IN625 合金 的力学性能, 揭示了激光功率以及扫描速度对成形 材料力学性能的影响.

# 1 有限胞元-自洽聚类分析方法

本文所发展的晶体塑性有限胞元-自洽聚类方 法 (crystal plasticity finite cell-self-consistent clustering analysis method, CPFC-SCAM)的基本框架如图1所 示,包括晶体塑性本构、有限胞元法和自洽聚类分 析方法三部分内容.具体而言,该方法可划分为离线 和在线计算两个阶段.其中,离线阶段包括采用FCM 对 RVE 进行高保真线弹性分析,并基于应变集中张 量和聚类算法对材料域聚类离散以获得离线数据 库;在线阶段采用自洽聚类分析方法并结合晶体塑 性本构求解 Lippmann-Schwinger (L-S)方程以获得 待求问题数值解.本节将主要介绍离线和在线阶段 的数值模拟方法.



图 1 丽体塑性有限胞儿-日右乘矢方机异莅性朱图 Fig. 1 Framework of the proposed CPFC-SCAM

#### 1.1 有限胞元法

有限胞元法通过虚拟域将真实材料域扩展为一 个规则的材料域,从而采用规则化网格离散求解,避 免了复杂的网格生成过程<sup>[24]</sup>.其中,采用惩罚因子识 别真实材料域,并通过自适应高斯积分方案和高阶 形函数保证求解精度,具体介绍如下.

#### 1.1.1 控制方程

考虑一个具有含有复杂内部孔洞的准静态问题, 如图 2 所示. 其中, Ω<sub>e</sub> 为物理域, Γ 为材料域边



图 2 有限胞元法基本思想:采用虚拟域将物理域拓展到规则形状的 扩展域,规则扩展域通过结构化网格离散

#### 界. 该问题的控制方程如下

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[ \nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} \right]$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma} (\boldsymbol{C}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \text{etc.})$$

$$\boldsymbol{u}|_{\Gamma_{\mathrm{D}}} = \hat{\boldsymbol{u}}$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}|_{\Gamma_{\mathrm{N}}} = \hat{\boldsymbol{t}}$$

$$(1)$$

式中,  $\sigma$  为应力张量,  $\varepsilon$  为应变张量, b 为体力, C 为 材料弹性系数矩阵, n 为边界的法向量,  $\hat{u}$  为在 Dirichlet 边界上( $\Gamma_{\rm D}$ )给定的位移,  $\hat{t}$  为在 Neumann 边界上( $\Gamma_{\rm N}$ )给定的面力.

#### 1.1.2 离散方程

本节以图 2 所示问题为例推导 FCM 的离散方程.通过虚拟域 Ω,将具有不规则形状的物理域 Ω, 进行拓展,形成具有规则形状的扩展域 Ω,从而可采 用结构化网格进行离散.针对引入的虚拟域,采用指 示函数 α(x) 作为其材料属性的乘法因子,并定义如下

Fig. 2 The basic idea of finite cell method: the physical domain  $\Omega_e$  is augmented by a fictitious domain  $\Omega_v$  to form a regular domain  $\Omega$  that is discretized by a structured mesh

第7期

$$\alpha(x) = \begin{cases} 1, & \forall x \in \Omega_e \\ 10^{-q}, & \forall x \in \Omega_v \end{cases}$$
(2)

式中, q 为与问题相关的经验参数,取值范围为 [5,10]以保证 α(x) ≪1.因此,可通过式 (2)将控制方 程 (1) 推广到扩展域上,进一步采用加权余量-伽辽 金法 (于本问题而言也是变分法)可得其等效积分弱 形式为

$$B(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = F(\boldsymbol{v}) \tag{3}$$

其中

$$B(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}) = \int_{\Omega} (\boldsymbol{L}\boldsymbol{v})^{\mathrm{T}} \alpha \boldsymbol{C}(\boldsymbol{L}\boldsymbol{u}) \mathrm{d}\boldsymbol{V}$$
(4)

$$F(\mathbf{v}) = \int_{\Omega} \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \alpha \mathbf{b} \mathrm{d}V + \int_{\Gamma_{\mathrm{N}}} \mathbf{v}^{\mathrm{T}} \hat{\mathbf{t}} \mathrm{d}A$$
(5)

式中, *L* 为一阶算子矩阵, *v* 为试探函数. 在扩展域上, 采用曲面积分施加 Newman 边界条件, 通过罚函数法实现 Dirichlet 边界条件. 采用具有 *n* 个节点的阶谱单元离散扩展域, 则单元内任一点位移可近似为

$$\boldsymbol{u} = \sum_{i=1}^{n} N_i \boldsymbol{u}_i \tag{6}$$

式中,下标*i*表示单元节点,*u<sub>i</sub>*为单元结点位移向量, *N<sub>i</sub>*为基于勒让德多项式的阶谱形函数,详见附录 A.

将式 (6) 代入式 (4) 和式 (5), 并结合式 (3) 可得 FCM 离散方程为

$$KU = F \tag{7}$$

式中, *K* 为全局刚度矩阵, *U* 为结点位移列向量, *F* 为载荷列向量.

FCM采用两套独立的网格求解方程 (7). 其中, 一套是求解网格,用于构建结点位移列向量,不解析 真实材料域,如图 3 中黑线所示;另一套则是精细积 分网格,如图 3 中蓝线所示,以获得精确的刚度矩阵. 针对扩展域离散网格中被真实材料边界划分的单 元 (称为切割胞元),该积分网格采用基于二维 4 叉 树 (二维问题)或者三维 8 叉树 (三维问题)的自适 应积分算法,形成多级分解组合高斯积分.以图 3 中 红色虚线圆圈内的单元为例,各个子单元中含有相 应的高斯积分点.其中,位于物理域内的高斯积分点 标为红色,位于虚拟域中的则标为蓝色.另外, k 表 示细分深度,原始胞元 k=0.对胞元进行是否被边 界分割的判断,若被分割则胞元进一步被细分为大



图 3 二维 4 叉树积分网格,其中局部放大图中的红点表示域内积分 点,蓝点为虚拟域积分点

小相同的 4 个子胞元, 对应细分深度为 k+1, 未被分割的胞元则分配相应数量的高斯积分点, 直至达到预设的细分深度. 从而实现真实材料域解析, 并确保积分精度.

#### 1.2 自洽聚类分析方法

自治聚类分析方法是一种基于 RVE 问题 L-S 控制方程的数据驱动算法. 与上述 FCM 不同, SCA 的基本原理是加权余量-子域法,并采用无监督学习 聚类算法对材料域进行子域划分以离散求解 L-S 方 程 (这也是其数据驱动属性的由来). 因此,本节采用 加权余量-子域法推导 SCA 离散方程,并且下文中 "子域"和"聚类"具有相同含义可交互使用.

# 1.2.1 代表体元问题的控制方程 非均质材料 RVE 问题的控制方程为

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}, \quad \forall \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{\Omega}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{C}, \boldsymbol{\varepsilon}, \boldsymbol{\sigma}, \text{etc.})$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left[ \nabla \boldsymbol{u} + (\nabla \boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} \right]$$

$$\boldsymbol{u}^{j+} - \boldsymbol{u}^{j-} = \boldsymbol{\varepsilon}^{0} \cdot \Delta \boldsymbol{x}^{j}$$

$$(8)$$

式中, 上标 *j*+和 *j*-分别表示沿 *j*轴的正方向和负方 向的一对平行相对边界面, ε<sup>0</sup> 为 RVE 的平均应变 (也称远场应变), Δ*x<sup>j</sup>* 为沿 *j*轴相对边界面的坐标差 值. 为建立 L-S 方程, 将应力改写为

$$\sigma(\mathbf{x}) = \mathbf{C}^* : \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{p}(\mathbf{x}) \tag{9}$$

式中, *C*\* 为一参考的各向同性材料的弹性系数矩阵, *p*(*x*) 为极化应力, 乃真实应力与参考应力*C*<sup>0</sup>:*ɛ*(*x*) 之 差. 将式 (9) 代入式 (8), 则可得 L-S 方程<sup>[20]</sup> 为

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}) + \int_{\boldsymbol{\Omega}} \boldsymbol{\Phi}^*(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') : \boldsymbol{p}(\boldsymbol{x}') d\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{\varepsilon}^0 = \boldsymbol{0}$$
(10)

式中,  $\Phi^*$  为对应于  $C^*$  的 RVE 问题格林函数, 在傅

里叶空间下的表达式为

$$\hat{\boldsymbol{p}}^{*}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{4\mu^{0}} \hat{\boldsymbol{\phi}}_{ijkl}^{1}(\boldsymbol{\xi}) + \frac{\lambda^{0} + \mu^{0}}{\mu^{0} (\lambda^{0} + 2\mu^{0})} \hat{\boldsymbol{\phi}}_{ijkl}^{2}(\boldsymbol{\xi})$$
(11)

其中

$$\hat{\boldsymbol{\Phi}}_{ijkl}^{1}(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{|\boldsymbol{\xi}|^{2}} \left( \delta_{ik} \xi_{j} \xi_{l} + \delta_{il} \xi_{j} \xi_{k} + \delta_{jl} \xi_{i} \xi_{k} + \delta_{jk} \xi_{i} \xi_{l} \right)$$

$$\hat{\boldsymbol{\Phi}}_{ijkl}^{2}(\boldsymbol{\xi}) = -\frac{\xi_{i} \xi_{j} \xi_{k} \xi_{l}}{|\boldsymbol{\xi}|^{4}}$$

$$(12)$$

式中,  $\boldsymbol{\xi}$ 是傅里叶空间中对应时域空间  $\boldsymbol{x}$  的坐标,  $\delta_{ij}$  为克罗内克尔符号,  $\lambda^0 \, \pi \, \mu^0$ 是对应于  $\boldsymbol{C}^*$  的拉梅常数.

为便于离散求解,将式(9)代入式(10),进一步 给出增量形式的 L-S 方程

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}) + \int_{\Omega} \boldsymbol{\Phi}^{*}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') : [\Delta \boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{x}') - \boldsymbol{C}^{*} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}')] d\boldsymbol{x}' - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{0} = \boldsymbol{0}$$
(13)

值得注意的是, L-S 积分方程的远场应变是给定 值, 从而可通过控制远场应变或应力实现 RVE 问题 的载荷施加, 即

$$\int_{\Omega} \Delta \boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}\boldsymbol{x} = V \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^0 \tag{14}$$

式中V为RVE体积.

综上,通过引入各向同性线弹性参考材料,将 RVE 控制方程(8)转换为以应变为未知量且包含格 林函数解的 L-S 方程,从而有助于降低问题精确求 解的离散规模.

## 1.2.2 离散方程

采用加权余量-子域法对控制方程 (10) 进行离 散求解. 假设采用 N 个子域离散 RVE, 相应的权函 数χ<sub>I</sub>(**x**) 取为

$$\chi_I(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1, & \boldsymbol{x} \in \mathcal{Q}_I \\ 0, & \boldsymbol{x} \notin \mathcal{Q}_I \end{cases}$$
(15)

相应的场变量 $\beta(x)$ (即 $\sigma(x)$ 和 $\varepsilon(x)$ )近似函数为

$$\boldsymbol{\beta}(\boldsymbol{x}) = \sum_{I=1}^{N} \boldsymbol{\beta}_{I} \boldsymbol{\chi}_{I}(\boldsymbol{x})$$
(16)

式中, *β*<sub>1</sub> 表示子域内的局部变量且在该子域内均匀 分布.依据加权余量法,对式(10)在全域内进行基于 式(13)的加权余量积分可得

$$\int_{\Omega} \chi_{I}(\mathbf{x}) \Delta \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) d\mathbf{x} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{0} V_{I} + \int_{\Omega} \int_{\Omega} \chi_{I}(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varPhi}^{*}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') :$$
$$[\Delta \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}') - \boldsymbol{C}^{*} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}')] d\mathbf{x}' d\mathbf{x}_{I} = \mathbf{0}$$
(17)

其中, V<sub>1</sub>表示子域1的体积.将近似函数式(16)代入式(17)中,可得

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{I} - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{0} + \sum_{J=1}^{N} \left[ \frac{1}{V_{I}} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \chi_{I}(\boldsymbol{x}) \chi_{J}(\boldsymbol{x}') \boldsymbol{\varPhi}^{*}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}' \, \mathrm{d}\boldsymbol{x} \right]:$$
$$(\Delta \boldsymbol{\sigma}_{J} - \boldsymbol{C}^{*} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{J}) = \boldsymbol{0}$$
(18)

进一步可简写为

报

$$\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{I} + \sum_{J=1}^{N} \boldsymbol{D}_{IJ} : (\Delta \boldsymbol{\sigma}_{J} - \boldsymbol{C}^{*} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{J}) - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{0} = \boldsymbol{0}$$
(19)

其中, DIJ 为相互作用张量且表达式如下

$$\boldsymbol{D}_{IJ} = \frac{1}{V_I} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \chi_I(\boldsymbol{x}) \chi_J(\boldsymbol{x}') \boldsymbol{\Phi}^*(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}' \, \mathrm{d}\boldsymbol{x}$$
(20)

相应地, 增量形式的宏观应变约束如下

$$\sum_{I=1}^{N} V_I \Delta \varepsilon_I = V \Delta \varepsilon^0 \tag{21}$$

式 (19) 和式 (21) 为 SCA 求解的离散方程,具体 包括离线和在线两个计算阶段.

## 1.2.3 离线阶段计算

离散阶段主要是完成材料域的子域离散和相互 作用张量分量计算以形成离线数据库,从而实现在 线阶段的计算.SCA采用材料点应变集中张量 A(x) 对 RVE 进行聚类离散,从而将力学行为相近的材料 点聚为一类形成一个空间上不必相连的子域.为此, 采用 FCM 获得 RVE 中各点应变集中张量分量,通 过无监督学习 K-means 方法对其聚类.

为获得 RVE 内材料点的应变集中张量,采用 FCM 开展其线弹性响应高保真计算.对于确定的 RVE,其域内各材料点应变集中张量定义如下

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\text{micro}}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{macro}}$$
(22)

式中, *e*<sup>marco</sup> 为 RVE 宏观弹性应变, *e*<sup>micro</sup> 为指定点的弹性微观应变.对于三维问题, *A*(*x*) 有 36 个独立分量,可由正交加载条件下的 RVE 6 个线弹性响应数值模拟结果确定.考虑到金属增材制造成形材料可能具有复杂的内部孔隙缺陷,采用上述 FCM 求解该 6 个高保真计算工况.进一步,为了确保子域划分的精确性且不显著增加离线阶段弹性分析时间,采用一套精细格栅点存储求出的应变场.如图 4 所示,首先将 FCM 积分网格中积分点的值外推得到求解



图 4 离线计算: (a) 高保真 FCM 离散模型; (b) 格栅点; (c) 聚类结果

Fig. 4 Calculation of the offline stage calculation, including (a) the high fidelity FCM model, (b) grid points, and (c) the clusters

网格各胞元对应结点处的值,进而内插得到格栅点 的应变值.基于式(22)和6种载荷工况计算,可获得 格栅点所对应的应变集中张量值.

采用无监督学习算法对所获得的格栅点应变集 中张量进行聚类,并计算与子域相关的相互作用张 量分量.本文选用 K-means 聚类<sup>[25]</sup>算法,通过令每 个离散点到聚类中心的距离最小来实现聚类,其数 学表达式为

$$S = \operatorname{argmin} \sum_{J=1}^{N} \sum_{n \in S'} \left\| A_n - \bar{A}_J \right\|^2$$
(23)

式中,  $\bar{A}_J$ 为第J个类中所有点应变集中张量的平均 值,  $A_n$ 为该类集合S'中第n个点的应变集中张量. 通过指定子域数目N, 完成 RVE 的聚类离散, 如图 4 所示, 以减少其离散规模 (也称模型缩减).

由式 (12) 可知, 相互作用张量分量  $\hat{\boldsymbol{\phi}}_{ijkl}^{1}(\boldsymbol{\xi})$  和  $\hat{\boldsymbol{\phi}}_{ijkl}^{2}(\boldsymbol{\xi})$  仅与子域划分相关, 因此可在离线阶段进行 计算存储以备在线计算调用. 依据聚类结果, 计算  $\hat{\boldsymbol{\phi}}_{ijkl}^{1}(\boldsymbol{\xi})$  和 $\hat{\boldsymbol{\phi}}_{ijkl}^{2}(\boldsymbol{\xi})$ , 从而根据Lame 常数即可获得相 互作用张量; 若参考材料刚度于在线阶段计算中发 生改变, 也仅需更新Lame 常数.

1.2.4 在线阶段

在线阶段依据聚类结果并根据控制方程开展具体物理问题分析.如图 5 所示,根据施加的应变载荷并结合具体的弹塑性本构模型,求解式 (19) 和式 (21),最后通过均匀化方法获得宏观等效应力-应变关系.

对于非线性弹塑性本构关系,式(19)是非线性







方程.因此,采用 Newton-Raphson (N-R) 迭代法求解,其残差为

$$\boldsymbol{r}_{I} = \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{I} + \sum_{J=1}^{N_{c}} \boldsymbol{D}_{IJ} : (\Delta \boldsymbol{\sigma}_{J} - \boldsymbol{C}^{*} : \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_{J}) - \Delta \boldsymbol{\varepsilon}^{0}$$
(24)

增量应变的更新为

$$\{\delta \boldsymbol{\varepsilon}\} = -\{\boldsymbol{M}\}^{-1}\{\boldsymbol{r}\}$$
(25)

其中, MIJ 为系统雅可比矩阵并计算如下

$$\boldsymbol{M}_{IJ} = \frac{\partial \boldsymbol{r}_I}{\partial \Delta \boldsymbol{\varepsilon}_J} = \delta_{IJ} \boldsymbol{\Pi} + \sum_{J=1}^N \boldsymbol{D}_{IJ} : (\boldsymbol{C}_J - \boldsymbol{C}^*)$$
(26)

式中, *δ*<sub>I</sub>J 为克罗内克符号, **Π** 为 4 阶单位张量, *C*<sub>J</sub> 为第 J 个子域所属材料的切线刚度矩阵.

此外,为保证计算精度和快速迭代收敛,采用自 治方法实时更新参考材料弹性系数矩阵*C*\*.对于各 向同性材料,*C*\*更新如下

$$C^* \to C_{\text{eff}} = \frac{\partial \Delta \sigma^0}{\partial \Delta \varepsilon^0} = \sum_{I=1}^N c_I \frac{\partial \Delta \sigma_I}{\partial \Delta \varepsilon^0} = \sum_{I=1}^N c_I \frac{\partial \Delta \sigma_I}{\partial \Delta \varepsilon_I} \frac{\partial \Delta \varepsilon_I}{\partial \Delta \varepsilon_I} = \sum_{I=1}^N c_I C_I^{\text{tan}} : A_I \qquad (27)$$

式中, c<sub>1</sub>和A<sub>1</sub>分别为第1个子域的体积分数以及应 变集中张量, C<sup>tan</sup>为第1个子域所属材料的一致切线 刚度矩阵.对于各向异性材料, 需将等效刚度矩阵投 影为最接近的各向同性刚度矩阵, 即

$$\boldsymbol{C}^* = (\boldsymbol{J} :: \boldsymbol{C}_{\text{eff}})\boldsymbol{J} + \frac{1}{5}(\boldsymbol{K} :: \boldsymbol{C}_{\text{eff}})\boldsymbol{K}$$
(28)

式中,4阶张量J和K的表达式为

其中, I为二阶单位张量.

综上,晶体塑性有限胞元-自洽聚类分析方法计算 流程如图 6 所示.离线阶段,首先采用 FCM 对含有复杂 内部几何结构的 RVE 进行线弹性响应求解,获得分 布均匀精细格栅点的应变集中张量;其次,采用 Kmeans 聚类算法对格栅点按给定数目聚类;最后,根据 聚类结果计算相互作用张量分量.在线阶段,结合晶 体塑性本构 (见第 2 节),采用自洽算法以及离线数据 库更新参考材料的弹性系数矩阵和相互作用张量, 通过 N-R 迭代法求解每一加载步下的 L-S 离散方程.

报



图 6 晶体塑性有限胞元-自洽聚类分析方法在线-离线两阶段求解示意图

Fig. 6 Schematic diagram of the CPFC-SCAM including the offline and online stages

## 2 晶体塑性本构模型

本节简要介绍 RVE 所采用的晶体塑性本构模型. 对于受连续变形梯度 F 的单晶体,可将其乘法 分解为弹性和塑性部分,即

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}^e \cdot \boldsymbol{F}^p \tag{30}$$

其中, 塑性部分 F<sup>p</sup> 将参考构型中的点映射到中间构 形上, 中间构形再通过弹性部分 F<sup>e</sup> 映射到当前构型 上. 塑性变形 F<sup>p</sup> 与滑移系上的位错运动相关, 其变 化率为

$$\dot{\boldsymbol{F}}^p = \tilde{\boldsymbol{L}}^p \cdot \boldsymbol{F}^p \tag{31}$$

式中, *L*<sup>p</sup> 为中间构形下的塑性速度梯度, 取决于晶体的滑移系位错, 即

$$\tilde{\boldsymbol{L}}^{p} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\boldsymbol{\gamma}}^{(\alpha)} \left( \tilde{\boldsymbol{s}}^{(\alpha)} \otimes \tilde{\boldsymbol{n}}^{(\alpha)} \right)$$
(32)

式中,  $\otimes$  表示并积,  $N_{\text{slip}}$  为滑移系的数目,  $\tilde{s}^{(\alpha)}$  和  $\tilde{n}^{(\alpha)}$ 分别为中间构形滑移系  $\alpha$  的滑移方向和滑移面法向;  $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$  为与滑移系  $\alpha$  相关的剪切速率且计算如下

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \left( \tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)} \right) \left| \tau^{(\alpha)} / g^{(\alpha)} \right|^{n-1}$$
(33)

式中,  $\dot{a}^{(\alpha)}$  为滑移系 $\alpha$  中的参考剪切速率, n 为应变 速率敏感指数,  $g^{(\alpha)}$  为描述当前滑移系硬化的变量,  $\tau^{(\alpha)}$  为分切应力.

分切应力*τ*<sup>(α)</sup>可由柯西应力σ和当前构型下的 滑移系所确定,即

$$\tau^{(\alpha)} = \boldsymbol{\sigma} : \left( \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{n}^{(\alpha)} \right) \tag{34}$$

式中, s<sup>(a)</sup> 和 n<sup>(a)</sup> 分别为当前构形下滑移系 a 的滑移 方向和滑移面法向, 可由 F<sup>e</sup> 确定. 柯西应力则由下 式给出

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{J_e} \left[ \boldsymbol{F}^e \cdot \boldsymbol{S}^e \cdot (\boldsymbol{F}^e)^{\mathrm{T}} \right]$$
(35)

式中,  $S^e$  为第二 Piola-Kirchhoff 应力,  $J_e \neq F^e$  的行 列式.

描述当前滑移系硬化的变量 g<sup>(α)</sup> 的初值假设为 滑移系 α 上的初始临界剪应力 τ<sub>0</sub>,其演化方程为

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} \left| \dot{\gamma}^{\beta} \right|$$
(36)

式中 $h_{\alpha\beta}$ 为滑移硬化模量.其中, $h_{\alpha\alpha}$ 与 $h_{\alpha\beta}$  ( $\alpha \neq \beta$ )分别为自身以及潜在硬化模量,依次计算如下

$$\begin{aligned} h_{\alpha\alpha} &= h(\gamma) = h_0 \mathrm{sech}^2 \left( \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \right) \\ h_{\alpha\beta} &= q h(\gamma) \quad (\alpha \neq \beta) \end{aligned}$$
 (37)

其中, h<sub>0</sub> 和τ<sub>s</sub> 为滑移系α上的初始硬化模量和饱和 剪应力, q 为潜在硬化系数, γ 为所有滑移系上的累 积剪切应变且计算如下

$$\gamma = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \int_{0}^{t} \left| \dot{\gamma}^{\alpha} \right| \mathrm{d}t \tag{38}$$

此外,为考虑晶粒尺寸效应,采用 Hall-Petch 关系来确定初始屈服应力

$$\tau_0 = \tau_\infty + \frac{K_y}{\sqrt{d}} \tag{39}$$

式中,  $K_y$  是 Hall-Petch 斜率, d 是晶粒等效直径,  $\tau_{\infty}$  是与晶粒尺寸无关的常数.

综上,对于确定的变形梯度 F,首先计算  $F^p$ ,进 一步可计算  $F^e$ .最后,依据中间构型下的弹性刚度 矩阵  $\tilde{C}$ ,由  $F^e$ 可获得应力  $S^e$  如下

$$\boldsymbol{S}^{e} = \frac{1}{2} \tilde{\boldsymbol{C}} \cdot \left[ \left( \boldsymbol{F}^{e} \right)^{\mathrm{T}} \boldsymbol{F}^{e} - \boldsymbol{I} \right]$$
(40)

# 3 数值算例

本节包括两类算例,分别是验证算例和应用算例.其中,验证算例包括理想多晶算例和含不规则孔隙的多晶算例,以验证 CPFC-SCAM 高效性和计算精度.应用算例针对 SLM 增材制造 IN625 合金,分析成形材料微观组织不同加载方向下的力学行为以及工艺参数对其力学性能的影响.本节所有算例均采用 i7-10700K 处理器单核计算.

## 3.1 多晶算例

该理想多晶算例设置如图 7 所示.其由 8 个晶 向不同但尺寸均为 40 μm × 40 μm × 40 μm 的晶粒组 成;各晶粒晶向采用欧拉角 (φ,θ,ψ)表示,并列于 表 1. 令材料为面心立方金属,包括 12 个滑移系,相 关材料参数列于表 2. 对 RVE 施加 PBC,并沿 *x* 方 向上单轴拉伸至远场应变为 2%,以求解其等效的应 力应变曲线.

分别采用 CPFEM, CPFCM 和 CPFC-SCAM 进 行求解, 增量步数均设为 100. 其中, CPFEM 采用 8 节点六面体单元离散, 单元数为 20 × 20 × 20, 并通



图 7 立方晶系材料代表体元,其中数字表示晶粒编号,颜色表示对 应于左下角反极图的晶向

Fig. 7 A cubic lattice material RVE with eight grains, where the number indicates the grain ID and the color shows the crystallographic orientation corresponding to the lower left inverse pole figure

| 表 1 | 由欧拉角表示的晶粒取向 |
|-----|-------------|
|     |             |

 Table 1
 The crystallographic orientation of each grain

 represented by Fuler angles

| Grain | Euler angle $\varphi$ | Euler angle $\theta$ | Euler angle $\psi$ |
|-------|-----------------------|----------------------|--------------------|
| 1     | 71.3                  | 59.8                 | 169.7              |
| 2     | 172.9                 | 68.6                 | 14.7               |
| 3     | 65.2                  | 3.7                  | 24.5               |
| 4     | 122.6                 | 35.4                 | 95.1               |
| 5     | 68.9                  | 38.5                 | 125.1              |
| 6     | 14.1                  | 1.2                  | 87.6               |
| 7     | 1.1                   | 19.4                 | 43.1               |
| 8     | 68.4                  | 42.2                 | 81.1               |

表 2 一种面心立方金属材料参数<sup>[26]</sup>

| Table 2 Materia | parameters | for a | face-centered | cubic metal | 26] |
|-----------------|------------|-------|---------------|-------------|-----|
|                 | -          |       |               |             |     |

| Parameter                                   | Value  |
|---|--------|
| elastic stiffness component $C_{11}$ /GPa   | 204.6  |
| elastic stiffness component $C_{22}$ /GPa   | 137.6  |
| elastic stiffness component $C_{44}$ /GPa   | 126.2  |
| reference shear rate $\dot{a}^{(\alpha)}$   | 50     |
| strain rate sensitivity exponent $n$        | 0.0005 |
| initial hardening modulus $h_0$ /MPa        | 500    |
| saturation stress $\tau_s$ /MPa             | 302    |
| critical resolved shear stress $\tau_0/MPa$ | 180    |

过 UMAT 子程序在商业有限元软件中进行求解; CPFCM 采用规则化网格, 胞元数为  $10 \times 10 \times 10$ , 形 函数阶次 p = 2, 8 叉树细分深度 k = 2, 通过自编程 序求解. CPFC-SCAM 的离线阶段所采用 FCM 的胞 元间距为 8  $\mu$ m, 形函数阶次为 2, 格栅点间距为 1.6  $\mu$ m; 图 8(a) 为离线阶段 x 方向加载下的弹性应 变云图 FCM 计算结果, 图 8(b) 为指定每个晶粒划 分为 4 个子域的聚类结果.

以 CPFEM 和 CPFCM 计算结果作为参考, 图 9 对比了不同离散设置下的 CPFC-SCAM 计算结果. 其中包括每个晶粒聚类为 1,4 和 32 的 CPFC-SCAM 结果.结果表明, CPFC-SCAM 获得的应力-应变曲线 在弹性阶段与参考解吻合一致,在塑性阶段虽稍有 差异但计算误差在 5% 以内,如图 9(b)所示.其中, 单个晶粒聚类数为 32 时计算结果相对误差在 2% 以内. 然而, CPFEM 耗时为 910 s, CPFC-SCAM 在每 个晶粒内部聚类数分别为 1,4 和 32 时的在线耗时 依次为 2,6 和 221 s (离线耗时分别为 29,37 和 158 s).针对该算例,在保证计算精度误差小于 5% 的前提下, CPFC-SCAM 采用总计 32 个离散子域的 在线计算效率约为 CPFEM 的 150 倍.

进一步采用纯剪切算例进行算法验证.对



RVE 施加 xy 方向剪切应变至 2%, 分别采用 CPFEM、 CPFCM 和 CPFC-SCAM 进行求解, 参数设置与上文 相同. 计算结果如图 10 所示, 其中 *ē*12 和*ō*12 分别代



(b) 黑色虚线矩形框中局部放大图,其中绿色区域为相对于CPFEM 计算结果的 5% 误差区间,红色区域为 2% 误差区间
 (b) A closer look at the dashed box of (a), where the error bands depicted in green and red correspond to 5% and 2% deviations, respectively, from the CPFEM result

图 9 多晶材料力学性能预测





图 10 多晶材料剪切加载力学性能预测,其中绿色区域为相对于 CPFEM 计算结果的 5% 误差区间

Fig. 10 Polycrystalline material's mechanical property prediction under shear loading, where the error bands depicted in green correspond to 5% from the CPFEM result 表 xy 方向上 RVE 平均应变和应力.结果表明,单个 晶粒聚类数为 32 时计算结果相对误差在 2% 左右, 验证了算法的准确性.

## 3.2 含不规则孔隙算例

本节考虑了含不规则孔隙的多晶 RVE 算例,以 验证所发展方法采用 FCM 相对于常用 FEM 进行离 线阶段计算的优势. 算例具体模型如图 11 所示,其 中 RVE 边长为 30 µm (不同颜色表示不同的晶粒, 内部黑色部分表示不规则孔隙),沿 x 方向单轴拉伸 至最大应变为 2%,材料参数如表 2 所示.

首先,对比 CPFEM 和 CPFCM 求解该 RVE 线 弹性响应的计算精度和效率.其中, CPFEM 采用体 素网格,分辨率为 30 × 30 × 30; CPFCM 采用规则化 网格并进行了收敛性分析,相关单元尺寸、形函数 阶次和细分深度设置如表 3 所示.

图 12 对比了两种数值模拟方法的平均应力应变 曲线. 在网格数量相同的情况下,随着形函数阶次及细 分深度的增加, CPFCM 的结果逐渐收敛于 CPFEM; 形函数阶次及细分深度相同的情况下,随着网格数 量的增加, CPFCM 的结果同样趋近于 CPFEM. 其 中 case5 工况计算结果与 CPFEM 计算结果差异小 于 1%,给出了对应的 Mises 应力云图如图 11 所示, 两者采用相同的比例尺,结果表明其云图相吻合,计



- 图 11 含不规则孔隙的多晶 RVE: (a) 晶粒结构模型 (黑色部分为孔 隙), (b) CPFEM 和 (c) CPFCM 计算的 Mises 应力云图
- Fig. 11 RVE with an irregular void: (a) Grain structure model, Mises stress distributions predicted by (b) CPFEM and (c) CPFCM

表 3 CPFCM 不同工况对应参数设置

| Table 5 Truincheal settings of CLITCIVI for unreferrit cases |
|--|
|--|

|       | Mesh size              | Order of shape function | Subdivision depth |
|-------|------------------------|-------------------------|-------------------|
| casel | $10\times10\times10$   | 1                       | 1                 |
| case2 | $10\times10\times10$   | 2                       | 2                 |
| case3 | $10\times10\times10$   | 2                       | 3                 |
| case4 | $10\times10\times10$   | 3                       | 2                 |
| case5 | 15 	imes 15 	imes 15   | 2                       | 2                 |
| case6 | $20\times 20\times 20$ | 2                       | 2                 |

第7期

算结果一致. 然而, CPFEM 耗时 239 s, 而 CPFCM 耗时 212 s. 综上表明, 针对该算例, CPFCM 在保证 计算精度的同时, 计算效率为 CPFEM 的近 2 倍.

进一步,分别采用上述 CPFEM、CPFCM 离散 模型和 CPFC-SCAM 求解了该 RVE 的弹塑性响应, 增量步数设置为 100. 其中, CPFC-SCAM 的离线计 算采用 CPFCM 设置同上 case5,并考虑了单个晶粒 内部分别聚类为 1,2 和 4 的工况.图 13 给出了指定 每个晶粒划分为 2 个子域的聚类结果.图 14 对比分 析了上述离散模型求解获得的等效应力应变曲线. 结果表明,每个晶粒含 2 个聚类的 CPFC-SCAM 计算结果相比于 CPFEM 和 CPFCM 预测值的计算 误差已小于 5%; 然而, CPFC-SCAM 在线耗时仅为 41 s (离线耗时为 133 s), CPFCM 耗时为 2928 s, CPFEM 耗时为 4578 s,再次证明了 CPFC-SCAM 的 高效性.

此外,为验证网格划分数量对计算结果收敛性



图 12 采用 CPFCM 和 CPFEM 计算 RVE 弹性响应的等效应力应变 曲线结果

Fig. 12 The effective stress-strain curves of the RVE under elastic deformation by CPFCM and CPFEM

的影响,进一步表征了离线阶段 CPFCM 不同工况 下对应在线预测的结果.分别使用表 3 中 case2、 case5 和 case6 设置参数进行离线计算,控制每个晶 粒内部聚类数量均为 4,在线预测结果与直接数值模 拟解对比如图 15 所示.结果表明,在相同聚类数目 的情况下,该算例中网格划分数量对最终精度影响 不大,3 种条件下误差均小于 3%,目前所采用参数 已保证收敛性.



图 13 含不规则孔隙的 RVE 聚类





图 14 含不规则孔隙多晶 RVE 不同数值模型的等效应力-应变曲线 计算结果

Fig. 14 Effective stress-strain curves of the RVE with irregular void from different numerical models



图 15 离线阶段不同网格划分数目所对应的在线预测等效应力-应 变曲线

Fig. 15 Effective stress-strain curves of the RVE correspond to different number of grid divisions in offline stage

## 3.3 增材制造 IN625 合金

本节采用 CPFC-SCAM 分析了 SLM 增材制造 IN625 合金力学性能及其与工艺参数之间的关系. 为此,首先采用实验结果对部分晶体塑性材料进行 标定,其次开展了同一 RVE 不同加载方向的算例研 究,最后分析不同工艺参数下成形材料微观组织等 效力学性能.其中,SLM 工艺参数和实验结果参考 AM-Bench<sup>[27-28]</sup>,材料微观组织采用本课题组建立的 经实验验证的元胞自动机有限体积法<sup>[29]</sup>模拟获得.

#### 3.3.1 实验设置及材料参数标定

AM-Bench 中的实验由美国国家技术标准局设 计并开展.其中,SLM 增材制造设备选用 EOS M270, 令激光在 IN625 基板上进行单向扫描以获得试样. 实验选用的激光功率为 195 W,扫描速度为 800 mm/s, 基板表面激光束直径为 100 μm. 实验所得熔池稳定 后的横截面形貌尺寸及微观组织和相应的数值模拟 结果如图 16 所示;对比表明,两者在熔池宽、深以 及微观组织形貌方面相吻合.

基于所验证的单道扫描材料微观组织三维数值 模拟结果,选取 RVE 并进行晶体塑性参数校准.为 保证所选取的 RVE 涵盖熔池内晶粒分布特征,其尺 寸确定为 30 µm × 30 µm × 30 µm,如图 17(a) 所示. 为校准相应的晶体塑性材料参数,采用 CPFEM 进 行数值模拟,并参考了 AM-Bench 2022 的标准试样 拉伸实验结果<sup>[28]</sup>(注:该试样虽非来源于上述单道扫 描区域,但其取自同一设备及相同工艺参数所制备 的块体材料,如图 17(b) 所示).该 CPFEM 离散模型



图 16 熔池形貌与材料微观组织的 (a) 数值模拟结果与 (b) 实验 结果<sup>[27]</sup> 对比, 其中白色虚线表示熔池边界

Fig. 16 Comparison of melt pool size and grain structure between (a) simulation results and (b) experiment data, where the white dashed lines indicate the melt pool boundary 的单元数为 30 × 30 × 30, 所得与实验结果一致的应 力-应变曲线如图 18 所示, 校核的材料参数列于表 4. 此外, 基于校核后的晶体塑性参数, 采用 CPFCM 开 展了相同弹塑性计算. 其离散模型胞元数为 30 × 30 × 30, 形函数阶数为 *p* = 1, 8 叉树细分深度 *k* = 1, 所得 等效的应力应变曲线计算结果与 CPFEM 结果对比 于图 18. 结果表明, 两者相吻合.

进一步,采用 CPFC-SCAM 开展了该 RVE 的弹 塑性响应分析.其中,离线阶段的 CPFCM 离散模型 同上,所得指定单个晶粒聚类数为 2 的聚类结果如 图 19 所示.图 20 列出了每个晶粒内部聚类数为 1, 2 和 4 时的等效应力应变曲线在线计算结果,对比 表明 CPFC-SCAM 的计算结果均位于相对于 CPFEM 计算结果的 3% 误差范围内.此外,该算例中 CPFEM 耗时 6136 s (设置固定步长 200),而 CPFC-SCAM 对



图 18 基于校准材料参数的数值计算结果与实验数据对比

Fig. 18 Comparison between numerical results with calibrated material parameters and experiment results

应于每个晶粒聚类数为 1, 2 和 4 的在线计算开销依 次为 8, 27 和 148 s. 因此,下面各节 CPFC-SCAM 算 例中,设置单个晶粒聚类总数为 2 以综合考虑计算 精度和耗时,采用表 4 中晶体塑性材料参数,以及与 本节离线阶段相同的 FCM 离散参数.

表 4 IN625 材料参数

| Table 4 Material parameters                           | for IN625               |
|---|-------------------------|
| Parameter   | Value                   |
| elastic stiffness component $C_{11}$ /GPa             | 243.3 <sup>[30]</sup>   |
| elastic stiffness component $C_{22}$ /GPa             | 156.7 <sup>[30]</sup>   |
| elastic stiffness component $C_{44}$ /GPa             | 117.8 <sup>[30]</sup>   |
| reference shear rate $\dot{a}^{(\alpha)}$             | 58.8 <sup>[30]</sup>    |
| strain rate sensitivity exponent $n$                  | 0.00242 <sup>[30]</sup> |
| initial hardening modulus <i>h</i> <sub>0</sub> /MPa  | 573.5 (calibrated)      |
| saturation stress $\tau_{s}$ /MPa                     | 400.6 (calibrated)      |
| intrinsic initial slip resistance $h_{\infty}$ /MPa   | 42.6 (calibrated)       |
| Hall-Petch coefficient $k_y/(MPa \cdot \sqrt{\mu m})$ | 750 <sup>[31]</sup>     |
| equivalent grain diameter d/µm                        | < 30                    |



图 19 RVE 聚类 Fig. 19 Clusters of the RVE



图 20 等效应力应变曲线计算结果,其中紫色区域为相对于 CPFEM 计算结果的 3% 误差区间

Fig. 20 Numerical results of effective stress-strain curves, where the error band depicted in purple corresponds to 3% deviations from the CPFEM result

3.3.2 不同加载方向成形材料力学性能分析

基于上述 CPFC-SCAM 数值模型和材料参数, 本节研究了激光功率为 165 W、扫描速度为 800 mm/s 成形材料微观组织力学性能的各向异性及其与初始 微观组织所决定的力学性能差异.为此,分别在未熔 融的基板以及熔池内截取材料微观组织代表体元, RVE1 和 RVE2,如图 21 所示;其尺寸均为 30 μm × 30 μm × 30 μm.

图 22 展示了 RVE1 和 RVE2 分别在 x, y 和 z



图 21 材料微观组织横截面图及选取的 RVE, 其中 RVE1 位于未熔 融的基板内, RVE2 位于熔池区域

Fig. 21 Cross-sectional view of the predicted microstructure and two selected RVEs, where RVE1 located in the un-melted substrate and RVE2 located in the melt pool





Fig. 22 Effective stress-strain curves predicted by CPFC-SCAM for cases with different loading directions

3 个方向单轴拉伸至 2% 应变下等效应力应变曲线. 结果对比表明,两个代表体元在各加载方向下弹性 阶段力学性能均相近,塑性阶段力学性能存在差异. 其中, RVE1 在 3 个加载方向上的塑性力学行为差异 相对较小,这是由于未熔融的基板区域内以等轴晶 为主,从图 21 所示 RVE 微观组织模型可以看出其 晶粒大小及分布较为均匀.相比之下, RVE2 选自熔 池区域,其材料凝固时温度分布不均且梯度方向分 布呈辐射状,相应的凝固微观组织以柱状晶为主并 也呈辐射状分布.图 22(b)表明 RVE2 在 3 个加载方 向上的塑性力学行为存在差异,其中 x 与 y 和 z 方 向力学性能差异较大, 而 y 和 z 方向力学性能差异 较小,这主要与晶粒空间分布和织构有关.

#### 3.3.3 不同工艺参数下成形材料力学性能分析

基于上述 CPFC-SCAM 数值模型和材料参数,本节进一步研究了激光功率和扫描速度对成形材料 力学性能的影响趋势,并分析其内在机理.工艺参数 设置如表 5 所示,其中 P 表示激光功率, V 表示激光 扫描速度,对所选取的熔池内 RVE 沿建造方向 (z 方 向) 施加单轴拉伸载荷至 2% 应变.

#### 图 23 和图 24 分别展示了相同激光功率不同扫









Fig. 23 Effective stress-strain curves of the fabricated material between different scan speeds with constant laser power

描速度和相同扫描速度不同激光功率下成形材料 RVE 的等效应力应变曲线.结果对比表明,在给定的 工艺参数范围内,随着扫描速度增大或者激光功率 降低, RVE 的屈服强度逐渐增强.这是由晶粒细化强 化所致,即 Hall-Petch 效应.图 25 给出了不同工艺参 数下,按晶粒大小降序排列的等效晶粒直径分布图. 图 25(a)中固定激光功率,较高的扫描速度导致较大 冷却速率,从而形成较小的晶粒等效直径;固定扫描 速度,则较低的激光功率对应较大的冷却速率,从而 导致较小的晶粒等效直径,如图 25(b)所示.综上,在 给定的工艺参数范围内,所研究的 SLM 增材制造



图 24 不同激光功率下成形材料等效应力-应变曲线

Fig. 24 Effective stress-strain curves of the fabricated material between different laser powers with constant scan speed



(a) Different scan speeds with constant laser power



(b) 不同激光功率相同扫描速度 (b) Different laser powers with constant scan speed



Fig. 25 Histogram of the grain sizes for different combinations of process parameters

IN625 材料随着扫描速度增大或者激光功率降低, 其力学性能增强.

## 4 总结

针对考虑增材制造金属材料真实微观组织的力 学性能高效预测问题,本文提出了基于数据驱动的 晶体塑性有限胞元-自洽聚类分析方法.与晶体塑性 有限元法相比,该方法在保证 RVE 求解精度的同时 具有较高的计算效率且有数量级的提升.其中,离线 阶段采用有限胞元法计算进一步提升了自治聚类分 析离线阶段计算效率.通过理想多晶算例和含不规 则孔隙的 RVE 算例,证明了所发展算法的计算精度 及效率.进一步,基于该算法开展了激光选区熔融成 形 IN625 合金力学性能的数值模拟研究,再现了成 形材料力学性能的各向异性,并揭示了冷却速率与 其力学性能增强的内在机制.本文工作为研究金属 增材制造"微观组织-力学性能"关联关系提供了一种 高效的数值模拟工具,为进一步实现成形构件力学 行为的高效并发多尺度数值模拟分析奠定了基础.

#### 参考文献

- 廉艳平, 王潘丁, 高杰等. 金属增材制造若干关键力学问题研究进展. 力学进展, 2021, 51(3): 648-701 (Lian Yanping, Wang Panding, Gao Jie, et al. Fundamental mechanics problems in metal additive manufacturing: A state- of-art review. *Advances in Mechanics*, 2021, 51(3): 648-701 (in Chinese))
- 2 陈泽坤, 蒋佳希, 王字嘉等. 金属增材制造中的缺陷、组织形貌和 成形材料力学性能. 力学学报, 2021, 53: 3190-3205 (Chen Zekun, Jiang Jiaxi, Wang Yujia, et al. Defects, microstructures and mechanical prop-erties of materials fabricated by metal additive manufacturing. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53: 3190-3205 (in Chinese))
- 3 Vafadar A, Guzzomi F, Rassau A, et al. Advances in metal additive manuf-acturing: a review of common processes, industrial applications, and current challenges. *Applied Sciences*, 2021, 11(3): 1213
- 4 Singh BJ, Sehgal R. Singh RP. Additive manufacturing in biomedical and healthcare sector : an umbrella review. *International Journal* on *Interactive Design and Manufacturing*, 2023, in press, DOI:10.1007/s12008-023-01524-0
- 5 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): 104-128 (Chen Jiawei, Xiong Feiyu, Huang Chenyang et al. Numerical simulation on metallic additive manufact-uring. *Sci Sin-Phys Mech Astron*, 2020, 50 (9): 104-128 (in Chinese))
- 6 Grasso M, Colosimo BM. Process defects and in situ monitoring methods in metal powder bed fusion: A review. *Measurement Sci*ence and Technology, 2017, 28(4): 044005
- 7 Debroy T, Wei H, Zuback J, et al. Additive manufacturing of metallic components-process, structure and properties. *Progress in Mater-*

ials Science, 2018, 92: 112-224

- 8 陈泽坤,李晓雁.金属增材制造过程中材料微观组织演化的模拟研究.力学进展, 2022, 52(2): 397-409 (Chen Zekun, Li Xiaoyan. Numerical simu-lations for microstructure evolution during metal additive manufacturing. *Advances in Mechanics*, 2022, 52(2): 397-409 (in Chinese))
- 9 Panwisawas C, Tang YT, Reed RC. Metal 3D printing as a disruptive tec-hnology for superalloys. *Nature Communications*, 2020, 11(1): 2327
- 10 Bang GB, Kim WR, Kim HK, et al. Effect of process parameters for sele-ctive laser melting with SUS316L on mechanical and microstructural prop-erties with variation in chemical composition. *Materi*als & Design, 2021, 197: 109221
- 11 Ma S, Chen X, Jiang M, et al. Surface morphology, microstructure and mechanical properties of Al-Mg-Sc alloy thin wall produced by laser-arc hybrid additive manufacturing. *Thin-Walled Structures*, 2023, 186: 110674
- 12 黄辰阳,陈嘉伟,朱言言等.激光定向能量沉积的粉末尺度多物理场数值模拟.力学学报,2021,53(12):3240-3251 (Huang Chenyang, Chen Jiawei, Zhu Yanyan et al. Powder scale multiphysics numerical model-ling of laser directed energy deposition. *Chinese Journal of Theoreticaland Applied Mechanics*, 2021, 53(12): 3240-3251 (in Chinese))
- 13 Yan W, Lian Y, Yu C, et al. An integrated process-structure-property mod-eling framework for additive manufacturing. *Computer Methodsin Applied Mechanics and Engineering*, 2018, 339: 184-204
- 14 Belytschko T, Liu WK, Moran B 等. 连续体和结构的非线性有限 元 (第二版). 庄茁, 译. 北京: 清华大学出版社, 2002: 519-541 (Belytschko T, Liu WK, Moran B, et al. Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures, 2nd edn. Zhuang Zhuo, trans. Beijing: Tsinghua University Press, 2002: 519-541 (in Chinese))
- 15 Zhang S, Lyu D, Xiong J. The effect of reversed austenite on mechanical properties of 13Cr4NiMo steel: A CPFEM study. *Journal of Materials Research and Technology*, 2022, 18: 2963-2976
- 16 朱继宏,曹吟锋,翟星玥等. 增材制造 316 钢高周疲劳性能的微观 力学研究. 力学学报, 2021, 53(12): 3181-3189 (Zhu Jihong, Cao Yinfeng, Zhai Xingyue et al. Micromechanical study of the high cycle fatigue property of additive-manufactured 316 steel. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(12): 3181-3189 (in Chinese))
- 17 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. 力学学报, 2021, 53(12): 3263-3273 (Yi Min, Chang Ke, Liang Chenguang, et al. Computational study of evolution and fatigue dispersity of microstructures by additive manufacturing. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(12): 3263-3273 (in Chinese))
- 18 Lebensohn RA, Kanjarla AK, Eisenlohr P. An elasto-viscoplastic formul-ation based on fast Fourier transforms for the prediction of micromechanicalfields in polycrystalline materials. *International Journal of Plasticity*, 2012, 32: 59-69
- 19 Eghtesad A, Shimanek JD, Shang SL, et al. Density functional theory in-formed dislocation density hardening within crystal plasticity : Application to modeling deformation of Ni polycrystals. *Computational Materials Science*, 2022, 215: 111803
- 20 Liu Z, Bessa M, Liu WK. Self-consistent clustering analysis: an efficient multi-scale scheme for inelastic heterogeneous materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2016, 306:

力

319-341

- 21 Yu C, Kafka OL, Liu WK. Self-consistent clustering analysis for multisc-ale modeling at finite strains. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2019, 349: 339-359
- 22 Kafka OL, Jones KK, Yu C, et al. Image-based multiscale modeling with spatially varying microstructures from experiments: Demonstrationwith add-itively manufactured metal in fatigue and fracture. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2021, 150: 104350
- 23 Düster A, Parvizian J, Yang Z, et al. The finite cell method for three dim-ensional problems of solid mechanics. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2008, 197(45-48): 3768-3782
- 24 Parvizian J, Düster A, Rank E. Finite cell method: h-and p-extension for embedded domain problems in solid mechanics. *Computational Mechanics*, 2007, 41(1): 121-133
- 25 MacQueen J. Some methods for classification and analysis of multivariateobservations//Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematicalstatistics and Probability, 1967, 1(14): 281-297
- 26 El Shawish S, Cizelj L. Combining single-and poly-crystalline measure-ments for identification of crystal plasticity parameters. *Applicationto Austenitic Stainless Steel Crystals*, 2017, 7(6): 181
- 27 Lyle BL, Levine E. Ambench2018-description. https://www.ni-st. gov/ambench/amb2018-02-description/
- 28 Benzing J, Moser N, Kafka O, et al. AM bench 2022 challenge macroscaletensile tests at different orientations (CHAL-AMB2022-04-MaTTO). National Institute of Standards and Technology, https://doi.org/10.18434/mds2-2588
- 29 Xiong F, Gan Z, Chen J, et al. Evaluate the effect of melt pool convectio-non grain structure of IN625 in laser melting process using

experimentally validated process-structure modeling. *Journal of Materials Processing Technology*, 2022, 303: 117538

- 30 Saha S, Kafka OL, Lu Y, et al. Macroscale property prediction foradditivelymanufactured in625 from microstructure through advanced homogenization. *Integrating Materials and Manufacturing Innovation*, 2021, 10: 360-372
- 31 Kozar R, Suzuki A, Milligan W, et al. Strengthening mechanisms in poly-crystalline multimodal nickel-base superalloys. *Metallurgical* and Materials Transactions A, 2009, 40: 1588-1603

#### 附录 A

报

有限胞元法中阶谱形函数是由勒让德多项式构造,其定 义如下

$$L^{P}(\xi) = \sqrt{\frac{2P-1}{2}} \int_{-1}^{\xi} \phi^{P-1}(t) dt$$
 (A1)

式中 $\xi$ 为自然坐标系下对应坐标, P为形函数阶次,  $\phi^{P}(\xi)$ 为 自然坐标系中标准勒让德多项式

$$\phi^{P}(\xi) = \frac{1}{2^{p} p!} \frac{d^{p}}{d\xi^{p}} \left[ \left(\xi^{2} - 1\right)^{p} \right]$$
(A2)

一维的阶谱形函数具体定义如下

$$N^{1}(\xi) = 1/2 \cdot (1-\xi)$$

$$N^{2}(\xi) = 1/2 \cdot (1+\xi)$$

$$N^{P}(\xi) = L^{P-1}(\xi), \quad P = 3, 4, \cdots$$
(A3)

二维和三维问题的形函数则可由其通过乘积形式获得.