



(12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 114169189 B

(45) 授权公告日 2023. 06. 23

(21) 申请号 202111357923.9

G06F 119/14 (2020.01)

(22) 申请日 2021.11.16

G06F 119/08 (2020.01)

(65) 同一申请的已公布的文献号

申请公布号 CN 114169189 A

(56) 对比文件

CN 109946006 A, 2019.06.28

(43) 申请公布日 2022.03.11

审查员 许莹云

(73) 专利权人 北京科技大学

地址 100083 北京市海淀区学院路30号

专利权人 北京科技大学顺德研究生院

(72) 发明人 李洪波 梁培 张杰 孔宁

(74) 专利代理机构 北京市广友专利事务所有限

责任公司 11237

专利代理师 张仲波 于春晓

(51) Int. Cl.

G06F 30/23 (2020.01)

G01N 33/20 (2019.01)

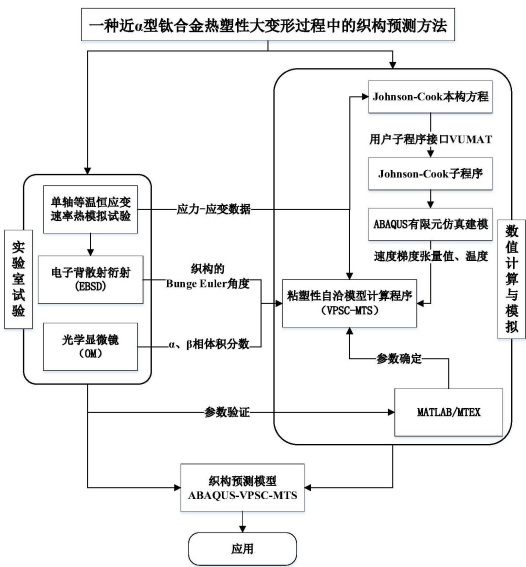
权利要求书5页 说明书17页 附图7页

(54) 发明名称

一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的
组织预测方法

(57) 摘要

本发明提供一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法,属于塑性成形技术领域。该方法首先利用单轴等温恒应变速率热模拟拉伸/压缩试验、电子背散射衍射技术、光学显微镜,获得近 α 型钛合金的应力-应变数据、热模拟大变形前后组织的Bunge Euler角度及 α 、 β 相体积分数;再通过数值推导和后处理获得近 α 型钛合金热塑性大变形过程中速度梯度张量值、时间增量;最后结合应力-应变数据与热模拟大变形前后组织的Bunge Euler角度,确定与优化机械阈值应力硬化法则的参数,建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型。该模型可预测近 α 型钛合金在大变形过程中的组织,能分析变形过程中的塑性变形机制、宏观力学行为及组织演化规律,有助于实现塑性加工产品形-性一体化的目的。



1. 一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的织构预测方法,其特征在于,包括步骤如下:

S1:使用光学显微镜获得近 α 型钛合金材料在不同温度下的金相组织图片,通过ImageJ软件的数字图像处理功能定量分析得到近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数,利用线性插值法获得温度区间内任一温度下近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数;

S2:根据近 α 型钛合金材料在热塑性大变形时处于的应力状态完成单轴等温恒应变速率热模拟试验,其中,应力状态为拉应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验,应力状态为压应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验,获得近 α 型钛合金材料在不同温度、不同应变速率下的应力-应变数据;

S3:选取S2中任意一个已完成单轴等温恒应变速率热模拟试验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样的图像数据,使用MATLAB-MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形后织构的Bunge Euler角度;

S4:取和S3中相同但未进行单轴等温恒应变速率热模拟试验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样在热塑性变形前的图像数据,使用MATLAB-MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度;

S5:根据S2中获得的应力-应变数据,利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数;

所述S5中利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数包括:

S51:采用Johnson-Cook本构方程,应力被定义为应变、应变速率和温度的函数:

$$\sigma = \left(A + B \cdot \varepsilon^n \right) \cdot \left(1 + C \cdot \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) \right) \cdot \left(1 - \left(\frac{T - T_r}{T_m - T_r} \right)^m \right) \quad (1)$$

其中: σ 为Von-Mises等效应力; A 为材料在参考温度和参考应变速率下的屈服强度; B 为加工硬化模量; ε 为应变; n 为硬化指数; C 为应变速率常数; $\dot{\varepsilon}_0$ 为应变速率参考值; m 为热软化常数;取 $T_r = 25^\circ\text{C}$; T_m 为材料的熔点温度; T 为单轴等温恒应变速率热模拟试验温度;

确定 A 、 B 、 n 、 C 、 m 是Johnson-Cook本构方程需要标定的5个参数;

S6:通过用户子程序接口VUMAT将S5的Johnson-Cook本构方程嵌入ABAQUS有限元软件中,通过数值推导与编程完成位移梯度张量向速度梯度张量的转换,将速度梯度张量值存储在用户子程序接口VUMAT的状态变量中,建立Johnson-Cook子程序;

S7:根据S3中观测试样在热塑性大变形过程中的几何形状、边界条件、载荷情况,采用S5确定的近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程参数及S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型,利用后处理,获得特征区域内任意一点的速度梯度张量值和时间增量;其中,特征区域为S3中电子背散射衍射技术EBSD观测位置;

S8:利用MATLAB-MTEX软件,使用随机织构的Bunge Euler角度、单调速度梯度、近 α 型钛合金在S2中单轴等温恒应变速率热模拟试验的温度、在此温度下由S1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分数、S4中热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度、S7中得到的速度梯度张量值和时间增量,以S2中的应力-应变数据、S3中的热塑性大变形后织构的Bunge Euler

角度为目标,基于粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数;

所述S8中确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数包括:

S81:粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序中基于变形物理机制的机械阈值应力MTS硬化法则:

$$\frac{\tau_c}{\mu} = \frac{\hat{\tau}_a}{\mu} + S_i(\dot{\varepsilon}, T) \frac{\hat{\tau}_i}{\mu_0} + S_\varepsilon(\dot{\varepsilon}, T) \frac{\hat{\tau}_\varepsilon}{\mu_0} \quad (2)$$

$$\mu = \mu_0 - \frac{D_0}{\exp\left(\frac{T_0}{T}\right) - 1} \quad (3)$$

$$S_i(\dot{\varepsilon}, T) = \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\mu b^3 g_{0i}} \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0i}}{\dot{\varepsilon}}\right) \right]^{1/q_i} \right\}^{1/p_i} \quad (4)$$

$$S_\varepsilon(\dot{\varepsilon}, T) = \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\mu b^3 g_{0\varepsilon}} \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}}\right) \right]^{1/q_\varepsilon} \right\}^{1/p_\varepsilon} \quad (5)$$

其中, τ_c 是流动应力; $\hat{\tau}_a$ 表征位错与长程障碍的相互作用, 单位为MPa; $\hat{\tau}_i$ 为由于间隙原子或溶质的相互作用而产生的热应力分量, $\hat{\tau}_\varepsilon$ 为由于可移动位错和林位错之间的相互作用而产生的热应力分量; μ 为剪切模量; $\dot{\varepsilon}$ 为应变速率; T 为单轴等温恒应变速率热模拟试验温度; μ_0 为参考剪切模量, 单位为MPa; T_0 为参考温度, 单位为K; D_0 为标度常数; $0 \leq p_i \leq 1$, $0 \leq p_\varepsilon \leq 1$, $1 \leq q_i \leq 2$, $1 \leq q_\varepsilon \leq 2$; k 表示Boltzmann常数; b 表示burgers矢量的大小;

$\hat{\tau}_\varepsilon$ 遵循以下演化规律:

$$\frac{d\hat{\tau}_\varepsilon}{d\varepsilon} = \theta_0 \frac{\mu}{\mu_0} \left[1 - \frac{\hat{\tau}_\varepsilon}{\hat{\tau}_{\varepsilon s}} \right]^\kappa \quad (6)$$

$$\ln\left(\frac{\hat{\tau}_{\varepsilon s}}{\hat{\tau}_{\varepsilon s0}}\right) = \frac{kT}{\mu b^3 g_{0\varepsilon s}} \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}}\right) \quad (7)$$

其中, θ_0 为初始硬化率, κ 是根据材料力学特性获得的常数; $\hat{\tau}_{\varepsilon s}$ 是饱和应力值; $g_{0\varepsilon s}$ 是相关归一化活化能; $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 表示参考饱和应力值, 单位为MPa; $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 是参考最大应变速率, 单位为 s^{-1} ;

确定 $k/\mu b^3$ 、 κ 、 $\hat{\tau}_a$ 、 μ_0 、 D_0 、 T_0 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 g_{0i} 、 $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 p_i 、 q_i 、 $g_{0\varepsilon}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 、 p_ε 、 q_ε 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{0\varepsilon s}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 是机械阈值应力MTS硬化法则需要确定的19个参数;

S9: 使用S8确定的机械阈值应力MTS硬化法则参数和S6建立的Johnson-Cook子程序, 结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序, 建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型;

S10: 根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情况, 使用S6建立的Johnson-Cook子程序, 在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型, 通过后处理得到的有限元模型内任意一点的速度梯度张量值和时间增量、近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始织构的Bunge Euler角度、变形温度、 α 与 β 相体积分数, 作为S9中

ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型输入,进行近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的组织预测。

2. 根据权利要求1所述的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法,其特征在于,所述S1中使用光学显微镜获得近 α 型钛合金材料在不同温度下的金相组织图片的具体步骤如下:

S11: 在25℃到近 α 型钛合金材料的相变温度 $T_{\alpha \rightarrow \beta}$ 的温度区间中,按150℃~200℃的间隔确定金相组织观测温度;

S12: 使用箱式电阻炉将观测试样加热到S11确定的金相组织观测温度后,保温10min,随后将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出;

S13: 将S12中试样表面氧化层完全去除,制成金相试样,利用光学显微镜获得金相组织图片。

3. 根据权利要求1所述的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法,其特征在于,所述S2中获得钛合金材料在不同温度、不同应变速率下的应力-应变数据的具体步骤如下:

S21: 单轴等温恒应变速率热模拟试验温度范围为25℃到 $T_{\alpha \rightarrow \beta}+300^\circ\text{C}$,按100℃~150℃的温度间隔进行应变速率分别为 0.01s^{-1} 、 0.1s^{-1} 、 1s^{-1} 、 10s^{-1} 的单轴等温恒应变速率热模拟试验;

S22: 单轴等温恒应变速率热模拟试验结束后,将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出作为S3中选取的S2中已完成单轴等温恒应变速率热模拟试验的试样。

4. 根据权利要求1所述的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法,其特征在于,所述S5中利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数还包括:

S52: 利用非线性最小二乘法确定S51中的5个参数,优化目标为S值最小化:

$$r_i = \sigma(\varepsilon_i) - \hat{\sigma}(\varepsilon_i) \quad (8)$$

$$S = \sum_{i=1}^h r_i^2 \quad (9)$$

其中, ε_i 代表第*i*个数据点的应变值; $\sigma(\varepsilon_i)$ 代表在应变为 ε_i 时Johnson-Cook本构方程得到的应力值; $\hat{\sigma}(\varepsilon_i)$ 代表在应变为 ε_i 时S2中单轴等温恒应变速率热模拟试验获得的应力值; r_i 代表 $\hat{\sigma}(\varepsilon_i)$ 与 $\sigma(\varepsilon_i)$ 的残差; S 代表 r_i 的平方和。

5. 根据权利要求1所述的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法,其特征在于,所述S9中建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型,基于近 α 型钛合金的应力-应变数据在有限元软件ABAQUS和粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序中的应用及在两者之间的转换与传递,针对一种近 α 型钛合金不同的热塑性大变形过程,不需要改变S8确定的机械阈值应力MTS硬化法则参数和S6建立的Johnson-Cook子程序。

6. 根据权利要求1所述的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法,其特征在于,所述S8中确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数还包括:

S82: 分别明确近 α 钛合金材料中 α 、 β 相与物理特性相关的参数: μ_0 、 D_0 、 T_0 、 $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 p_i 、 q_i 、 g_{0e} 、

p_ε 、 q_ε 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 、 κ 、 k 、 b ，由式(3)计算 μ ，确定 $k/\mu b^3$ 的值；

S83: $\hat{\tau}_a$ 通过如下公式计算：

$$\hat{\tau}_a = \frac{146}{\sqrt{d_{gs}}} \quad (2)$$

其中， d_{gs} 表示晶粒尺寸，单位为 μm ；

S84: 近 α 钛合金材料中 α 相的机械阈值应力MTS硬化法则参数 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{0\varepsilon s}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 确定步骤如下：

(1) 采用S2中在 $25^\circ\text{C} \sim T_{\alpha\rightarrow\beta} + 300^\circ\text{C}$ 获得的应力-应变数据，确定 $25^\circ\text{C} \sim 250^\circ\text{C}$ 温度范围内不同温度、不同应变速率下的屈服应力 τ_{YS} ； $T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 为近 α 型钛合金材料的相变温度；

(2) 使用S82、S83、S84(1)确定的参数，利用MATLAB软件，通过式(11)、式(12)进行线性化处理，基于非线性最小二乘法，确定式(13)的斜率 m 及截距 c ：

$$X = \left[\frac{kT}{\mu b^3} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0i}}{\dot{\varepsilon}} \right) \right]^{1/q_i} \quad (3)$$

$$Y = \left[\frac{\tau_{YS} - \hat{\tau}_a}{\mu} \right]^{p_i} \quad (4)$$

$$Y = mX + c \quad (5)$$

通过式(14)、式(15)确定 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ ：

$$g_{0i} = - \left(\frac{m}{c} \right)^{-q_i} \quad (6)$$

$$\hat{\tau}_i = \mu_0 c^{1/p_i} \quad (7)$$

(3) 利用MATLAB-MTEX工具箱获取500个随机取向织构的Bunge Euler角度；

(4) 确定单调速度梯度 L ：

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & -e/2 & 0 \\ 0 & 0 & -e/2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

其中，当采用单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验时规定 e 为正值，当采用单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验时规定 e 为负值；

(5) 在MATLAB软件中采用信赖域算法，结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序，使用S82、S83、S84(2)获得的 α 相的机械阈值应力MTS硬化法则参数，以 $\theta_0 = 1000$ 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0} = 500$ 、 $g_{0\varepsilon s} = 20$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0} = 1 \times 10^7$ 为初始猜想，以S84(3)的Bunge Euler角度、 $V_T^\alpha = 1$ 、 $V_T^\beta = 0$ 、S84(4)中的单调速度梯度、S84(1)中的 $25^\circ\text{C} \sim 250^\circ\text{C}$ 温度范围内不同温度为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入，进行迭代计算； V_T^α 、 V_T^β 分别表示温度 T 时 α 相体积分数和 β 相体积分数；

(6) 基于非线性最小二乘法，以粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序得到的应力-应变数据与S84(1)中同样温度、应变速率下的实测应力-应变数据差值平方最小为优化目标，确定 α 相的 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{0\varepsilon s}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 值；

S85:近 α 钛合金材料中 β 相的机械阈值应力MTS硬化法则参数 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{0\varepsilon s}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 确定步骤如下:

(1) 采用S2中在 $25^\circ\text{C} \sim T_{\alpha \rightarrow \beta} + 300^\circ\text{C}$ 获得的应力-应变数据,确定 $T_{\alpha \rightarrow \beta}$ 以上温度范围内不同温度、不同应变速率下的屈服应力 τ_{YS} ;

(2) 使用S82、S83、S85(1)确定的参数,利用MATLAB软件,通过式(11)、式(12)进行线性化处理,基于非线性最小二乘法,确定式(13)的斜率 m 及截距 c ,通过式(14)、式(15)确定 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$;

(3) 通过式(16)确定单调速度梯度 L ;

(4) 在MATLAB软件中采用信赖域算法,结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,使用S82、S83、S85(2)获得的 β 相的机械阈值应力MTS硬化法则参数,以 $\theta_0 = 1000$ 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0} = 500$ 、 $g_{0\varepsilon s} = 20$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0} = 1 \times 10^7$ 为初始猜想,以S84(3)的Bunge Euler角度、 $V_T^\alpha = 0$ 、 $V_T^\beta = 1$ 、S85(3)中的单调速度梯度、S85(1)中的 $T_{\alpha \rightarrow \beta}$ 以上温度范围内不同温度为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入,进行迭代计算;

(5) 基于非线性最小二乘法,以粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序得到的应力-应变数据与S85(1)中同样温度、应变速率下的实测应力-应变数据差值平方最小为优化目标,确定 β 相的 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{0\varepsilon s}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 值;

S86:使用S82、S83、S84、S85获得的 α 、 β 相的机械阈值应力MTS硬化法则参数,以近 α 型钛合金在S3中单轴等温恒应变速率热模拟试验的温度、在此温度下由S1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分数、S4中热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度、S7中得到的速度梯度张量值和时间增量为作为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入,进行计算。

7. 根据权利要求1所述的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的织构预测方法,其特征在于,所述S10中进行近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的织构预测具体步骤如下:

S101:在ABAQUS有限元仿真软件中进行的操作包括:

(1) 根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情况,使用S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型并验证;

(2) 使用S6建立的Johnson-Cook子程序进行仿真,利用ABAQUS后处理,选取有限元模型内任意一点进行热塑性大变形过程中速度梯度张量值、时间增量的输出;

S102:粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入包括:

(1) 热塑性大变形温度;

(2) 根据S1计算得到的 α 、 β 相体积分数;

(3) 利用背散射衍射技术EBSD并数据处理后得到的近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始织构的Bunge Euler角度;

(4) 由S101获得的速度梯度张量值、时间增量;

S103:S102计算结果的输出文件包含热塑性大变形过程中织构的Bunge Euler角度,通过MATLAB-MTEX后处理获得近 α 型钛合金在此热塑性大变形过程中的织构极图,完成近 α 型钛合金在此热塑性大变形过程中的织构预测。

一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法

技术领域

[0001] 本发明涉及塑性成形技术领域,特别是指一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法。

背景技术

[0002] 钛及钛合金因其具备优质结构材料所需的轻质、高强、耐热、耐蚀、抗冲击震动、可加工性好等特性,在空、天、地、海等关键领域具有广泛的用途。钛及钛合金由于常温下晶体密排六方结构(Hexagonal close-packed,HCP)的特殊性,导致塑性变形困难并且极易形成较强的组织,对产品的塑性加工过程及力学性能产生巨大的影响。因此,在热塑性大变形条件下进行塑性加工的同时对组织进行预测对钛合金的生产及应用具有重要的作用。

[0003] 钛合金的热塑性大变形加工是一个多场、多因素作用下的高度非线性过程,材料要经历复杂的高温塑性变形和微观演变,这种交互作用规律决定了合金的组织,最终会影响到产品的质量和性能。但试验测试具有一定的局限性,难以实现复杂条件加载、微观组织结构的实时测量,难以全面探索塑性变形机制。因此,有必要建立一个在不同的热变形条件下能够描述钛合金塑性变形行为模型,从而实现对钛合金在塑性变形中的组织演化行为的有效监控,进而优化塑性加工工艺且实现塑性加工产品形-性一体化的目的。

[0004] 文献1(Jie Z,Li C,Kwa B,et al.Effects of strain state and slip mode on the texture evolution of a near- α TA15 titanium alloy during hot deformation based on crystal plasticity method[J].Journal of Materials Science& Technology,2020,38:125-134.)通过晶体塑性有限元模拟分析了不同高温应变状态下TA15钛合金的组织演化行为,但由于钛合金宏观构件与晶体塑性模型的单元不在同一尺度,计算量过大无法直接模拟复杂加载情况下的塑性成形过程,这促进了宏观有限元耦合组织模拟方法的发展;文献2(Li H,Wei D,Zhang H,Yang H,Liu H,Liu S,Chu Z,Zhang D,Texture evolution and controlling of high-strength titanium alloy tube in cold pilgering for properties tailoring,Journal of Materials Processing Tech,2020,279)通过三维有限元模型和粘塑性自洽(VPSC)晶体塑性模型的耦合,考虑变形历史对空心管冷轧过程中的非均匀变形流动和组织演化进行了预测,但是冷轧并不涉及到温度这一影响因素;文献3(陈立全.TC18钛合金锻造过程有限元模拟和组织预测[D].北京:北京科技大学,2019.)模拟了钛合金TA18三向锻造组织演变过程和不同条件下压缩组织并解释了锻造组织形成原因,但是由于采用的本构模型并没有考虑温度、应变速率的影响,针对不同的变形条件下均需要进行试验用来标定一组模型参数。且以上研究均没有考虑到不同温度下钛合金两相的体积变化,以及对宏观力学性能与微观组织演化的影响。

[0005] 本发明在实验室试验的基础上,综合考虑了温度、速度梯度、 α 、 β 两相体积分数等因素,通过宏观有限元耦合组织模拟技术,可实现对不同两相体积分数的近 α 型钛合金在复杂加载的热塑性加工条件下的塑性变形机制的研究及宏观力学性能、微观组织演化规律的预测。

发明内容

[0006] 本发明为避免大量繁琐的实验并进行实现复杂加载路径下的织构预测,提供一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的织构预测方法,依托于数据流的传递,在实验室试验的基础上结合宏观有限元耦合织构模拟技术实现近 α 型钛合金材料在热塑性大变形下织构的演化规律预测与分析。

[0007] 该方法首先利用单轴等温恒应变速率热模拟拉伸/压缩试验、电子背散射衍射技术(EBSD,Electron Backscatter Diffraction)、光学显微镜(OM,Optical Microscope),获得近 α 型钛合金的应力-应变数据、热模拟大变形前后织构的Bunge Euler角度及 α 、 β 相体积分数;随后利用应力-应变数据建立本构方程并通过用户子程序接口VUMAT将本构方程嵌入ABAQUS有限元软件中,通过数值推导和后处理获得近 α 型钛合金热塑性大变形过程中速度梯度张量值、时间增量;基于粘塑性自洽模型(Visco-Plastic Self-Consistent,VPSC)数值计算程序,结合应力-应变数据与热模拟大变形前后织构的Bunge Euler角度,利用MATLAB/MTEX确定与优化机械阈值应力(MTS,the Mechanical Threshold Stress)硬化法则的参数,建立了ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型。该模型考虑了 α 、 β 两相的体积分数、温度、速度梯度等变形历史对钛合金力学性能的影响,可预测近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的织构,能分析变形过程中的塑性变形机制、宏观力学行为及织构演化规律,有助于实现塑性加工产品形-性一体化的目的。

[0008] 该方法包括步骤如下:

[0009] S1:使用光学显微镜获得近 α 型钛合金材料在不同温度下的金相组织图片,通过ImageJ软件的数字图像处理功能定量分析得到近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数,利用线性插值法获得温度区间内任一温度下近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数;

[0010] S2:根据近 α 型钛合金材料在热塑性大变形时处于的应力状态完成单轴等温恒应变速率热模拟试验,应力状态为拉应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验,应力状态为压应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验,获得钛合金材料在不同温度、不同应变速率下的应力-应变数据;

[0011] S3:选取S2中任意一个已完成热模拟试验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样的图像数据,使用MATLAB/MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形后织构的Bunge Euler角度;

[0012] S4:取和S3中相同但未进行热模拟实验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样在热塑性变形前的图像数据,使用MATLAB/MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度;

[0013] S5:根据S2中获得的应力-应变数据,利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数;

[0014] S6:通过用户子程序接口VUMAT将S5的Johnson-Cook本构方程嵌入ABAQUS有限元软件中,通过数值推导与编程完成位移梯度张量向速度梯度张量的转换,将速度梯度张量值存储在用户子程序接口VUMAT的状态变量中,建立Johnson-Cook子程序;

[0015] S7:根据S3中观测试样在热塑性大变形过程中的几何形状、边界条件、载荷情况,采用S5确定的近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程参数及S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型,利用后处理,获得特征区域内任

意一点的速度梯度张量值和时间增量;其中,特征区域为S3中电子背散射衍射技术EBSD观测位置;

[0016] S8:利用MATLAB/MTEX软件,使用随机织构Bunge Euler角度、单调速度梯度、近 α 型钛合金在S2中热模拟试验的温度、在此温度下由S1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分数、S4中热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度、S7中得到的速度梯度张量值和时间增量等数据,以S2中的应力-应变数据、S3中的热塑性大变形后织构的Bunge Euler角度为目标,基于粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数;

[0017] S9:使用S8确定的机械阈值应力MTS硬化法则参数和S6建立的Johnson-Cook子程序,结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型;

[0018] S10:根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情况,使用S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型,通过后处理得到的有限元模型内任意一点的速度梯度张量值和时间增量以及近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始织构的Bunge Euler角度、 α 与 β 相体积分数,变形温度作为S9中ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型输入,进行近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的织构预测。

[0019] 其中,S1中使用光学显微镜获得近 α 型钛合金材料在不同温度下的金相组织图片的具体步骤如下:

[0020] S11:在室温25℃到近 α 型钛合金材料的相变温度 $T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 的温度区间中,按一定的间隔(150℃~200℃)确定金相组织观测温度;

[0021] S12:使用箱式电阻炉将观测试样加热到S11确定的金相组织观测温度后,保温10min,随后将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出;

[0022] S13:将S12中试样表面氧化层完全去除,制成金相试样,利用光学显微镜获得金相组织图片。

[0023] S1中利用线性插值法获得温度区间内任一温度下近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数具体计算过程如下:

[0024] 当 $T < T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 时:

$$[0025] \quad \begin{cases} V_T^\alpha = \frac{T-T_2}{T_1-T_2} V_{T_1}^\alpha + \frac{T-T_1}{T_2-T_1} V_{T_2}^\alpha \\ V_T^\beta = 1 - V_T^\alpha \end{cases} \quad (1)$$

[0026] 当 $T \geq T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 时:

$$[0027] \quad V_T^\alpha = 0, V_T^\beta = 1 \quad (2)$$

[0028] 其中, $T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 为近 α 型钛合金材料的相变温度; T_1 、 T_2 为S11中相邻的两个金相组织观测温度; T 表示在区间 $[T_1, T_2]$ 内的任一研究温度,其中 $T < T_{\alpha\rightarrow\beta}$; V_T^α 、 V_T^β 分别表示温度 T 时 α 相体积分数和 β 相体积分数; $V_{T_1}^\alpha$ 、 $V_{T_2}^\alpha$ 分别表示温度 T_1 、 T_2 时 α 相体积分数。

[0029] S2中获得钛合金材料在不同温度、不同应变速率下的应力-应变数据的具体步骤如下:

[0030] S21:试验温度范围为室温25℃到 $T_{\alpha\rightarrow\beta}+300^\circ\text{C}$,按一定的温度间隔(100℃~150℃)进行应变速率分别为 0.01s^{-1} 、 0.1s^{-1} 、 1s^{-1} 、 10s^{-1} 的单轴等温恒应变速率热模拟试验;

[0031] S22:单轴等温恒应变速率热模拟试验结束后,将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出作为S3中电子背散射衍射技术EBSD观测试样。

[0032] S4中利用电子背散射衍射技术EBSD获得S3中观测试样在热塑性变形前的图像数据具体步骤如下:

[0033] S4.1:取一近 α 型钛合金试样,使用箱式电阻炉将观测试样加热到S3中观测试样的温度后,保温10min;

[0034] S4.2:将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出,制成EBSD试样并观测,获取图像数据。

[0035] S5中利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数具体步骤如下:

[0036] S51:采用Johnson-Cook本构方程,应力被定义为应变、应变率和温度的函数:

$$[0037] \quad \sigma = \left(A + B \cdot \varepsilon^n \right) \cdot \left(1 + C \cdot \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) \right) \cdot \left(1 - \left(\frac{T - T_r}{T_m - T_r} \right)^m \right) \quad (3)$$

[0038] 其中: σ 为Von-Mises等效应力; A 为材料在参考温度和参考应变速率下的屈服强度; B 为加工硬化模量; ε 为应变; n 为硬化指数; C 为应变速率常数; $\dot{\varepsilon}$ 为等效塑性应变率; $\dot{\varepsilon}_0$ 为应变速率参考值; m 为热软化常数; T_r 参考温度,取室温 $T_r = 25^\circ\text{C}$; T_m 为材料的熔点温度; T 为试验温度;

[0039] 确定 A 、 B 、 n 、 C 、 m 是Johnson-Cook本构方程需要标定的5个参数;

[0040] S52:利用非线性最小二乘法确定S51中的5个材料参数,优化目标为 S 值最小化:

$$[0041] \quad r_i = \sigma(\varepsilon_i) - \hat{\sigma}(\varepsilon_i) \quad (4)$$

$$[0042] \quad S = \sum_{i=1}^n r_i^2 \quad (5)$$

[0043] 其中, ε_i 代表第 i 个数据点的应变值; $\sigma(\varepsilon_i)$ 代表在应变为 ε_i 时Johnson-Cook本构方程得到的应力值; $\hat{\sigma}(\varepsilon_i)$ 代表在应变为 ε_i 时S2中试验获得的应力值; r_i 代表真实应力值 $\hat{\sigma}(\varepsilon_i)$ 与模拟应力值 $\sigma(\varepsilon_i)$ 的残差; S 代表残差 r_i 的平方和。

[0044] S6中通过用户子程序接口VUMAT将S4的Johnson-Cook本构方程嵌入ABAQUS有限元软件中,使用FORTRAN语言,利用ABAQUS/Explicit二次开发接口,基于各向同性的Von Mises屈服准则,采用弹性预测-塑性修正的径向回退映射法和隐式积分算法。

[0045] S6中通过数值推导与编程完成位移梯度张量向速度梯度张量的转换的具体步骤如下:

[0046] S61:在连续介质力学中,变形梯度张量 $\mathbf{F}$ 和速度梯度张量 $\mathbf{L}$ 描述如下:

$$[0047] \quad \mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \quad (6)$$

$$[0048] \quad \mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \quad (7)$$

$$[0049] \quad \mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} \quad (8)$$

[0050] 其中, $\dot{\mathbf{x}}$ 表示 $\mathbf{x}$ 对时间的导数; $\mathbf{x}$ 为质点的空间坐标,即当前构形; $\mathbf{X}$ 为质点的物质坐

标,即参考构形; v 是在空间坐标 x 下质点变形后的速度;

[0051] 经过数学变换得变形梯度的速率方程:

$$[0052] \quad \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{L}\mathbf{F} \quad (9)$$

[0053] 在时间间隔 $[t_n, t_{n+1}]$ 中,假设 t_n 时刻下材料的状态变量,需求解时间增量 Δt 后,即在时刻 t_{n+1} 下的新状态;

[0054] 对上式进行全隐式时间积分,得:

$$[0055] \quad \mathbf{F}_{n+1} = \exp(\Delta t \mathbf{L}_{n+1}) \mathbf{F}_n \quad (10)$$

[0056] 进而用一阶泰勒展开式近似表达:

$$[0057] \quad \mathbf{F}_{n+1} \approx (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{L}_{n+1}) \mathbf{F}_n \quad (11)$$

[0058] 其中 $\mathbf{I}$ 是单位张量;

[0059] 将上式经过数学变换得速度梯度张量 $\mathbf{L}_{n+1}$ 的求解公式:

$$[0060] \quad \mathbf{L}_{n+1} = (\mathbf{F}_{n+1} \mathbf{F}_n^{-1} - \mathbf{I}) / \Delta t \quad (12)$$

[0061] S62:遵守用户子程序接口VUMAT的书写格式,利用主程序向用户子程序接口VUMAT提供的时间增量步 Δt 及其前后的变形梯度张量 $\mathbf{F}_n$ 、 $\mathbf{F}_{n+1}$,在用户子程序接口VUMAT分别用固定名称 dt 、 $defgradOld$ 、 $defgradNew$ 表示,采用Fortran语言对上式进行程序编写计算速度梯度张量 $\mathbf{L}_{n+1}$ 。

[0062] S8中利用MATLAB/MTEX确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数的具体步骤如下:

[0063] S81:粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序中基于变形物理机制的机械阈值应力MTS硬化法则:

$$[0064] \quad \frac{\tau_c}{\mu} = \frac{\hat{\tau}_a}{\mu} + S_i(\dot{\epsilon}, T) \frac{\hat{\tau}_i}{\mu_0} + S_\epsilon(\dot{\epsilon}, T) \frac{\hat{\tau}_\epsilon}{\mu_0} \quad (13)$$

$$[0065] \quad \mu = \mu_0 - \frac{D_0}{\exp\left(\frac{T_0}{T}\right) - 1} \quad (14)$$

$$[0066] \quad S_i(\dot{\epsilon}, T) = \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\mu b^3 g_{0i}} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}_{0i}}{\dot{\epsilon}}\right) \right]^{1/q_i} \right\}^{1/p_i} \quad (15)$$

$$[0067] \quad S_\epsilon(\dot{\epsilon}, T) = \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\mu b^3 g_{0\epsilon}} \ln\left(\frac{\dot{\epsilon}_{0\epsilon}}{\dot{\epsilon}}\right) \right]^{1/q_\epsilon} \right\}^{1/p_\epsilon} \quad (16)$$

[0068] 其中, τ_c 是流动应力; $\hat{\tau}_a$ 表征位错与长程障碍的相互作用,单位为MPa; $\hat{\tau}_i$ 为由于间隙原子或溶质的相互作用而产生的热应力分量, $\hat{\tau}_\epsilon$ 为由于可移动位错和林位错之间的相互作用而产生的热应力分量; μ 为剪切模量; $S_i(\dot{\epsilon}, T)$ 和 $S_\epsilon(\dot{\epsilon}, T)$ 是描述温度和应变速率相关性对流动应力影响的系数; $\dot{\epsilon}$ 为应变速率; T 为试验温度; μ_0 为参考剪切模量,单位为MPa; T_0 为参考温度,单位为K; D_0 为标度常数; $\dot{\epsilon}$ 表示等效应变速率; g_{0i} 、 $g_{0\epsilon}$ 表示克服障碍进行位错运动所需的归一化活化能; $\dot{\epsilon}_{0i}$ 、 $\dot{\epsilon}_{0\epsilon}$ 表示参考应变率,单位为 s^{-1} ;常数 p ($0 \leq p_i \leq 1$, $0 \leq p_\epsilon \leq 1$)、 q

($1 \leq q_i \leq 2, 1 \leq q_e \leq 2$) 描述位错运动遇到的障碍物形状; k 表示Boltzmann常数; b 表示burgers矢量的大小;

[0069] $\hat{\tau}_\varepsilon$ 遵循以下演化规律:

$$[0070] \quad \frac{d\hat{\tau}_\varepsilon}{d\varepsilon} = \theta_0 \frac{\mu}{\mu_0} \left[1 - \frac{\hat{\tau}_\varepsilon}{\hat{\tau}_{\varepsilon s}} \right]^\kappa \quad (17)$$

$$[0071] \quad \ln \left(\frac{\hat{\tau}_{\varepsilon s}}{\hat{\tau}_{\varepsilon s 0}} \right) = \frac{kT}{\mu b^3 g_{0\varepsilon s}} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s 0}} \right) \quad (18)$$

[0072] 其中, θ_0 为初始硬化率, κ 是根据材料力学特性获得的常数; $\hat{\tau}_{\varepsilon s}$ 是饱和应力值; $g_{0\varepsilon s}$ 是相关归一化活化能; $\hat{\tau}_{\varepsilon s 0}$ 表示参考饱和应力值,单位为MPa; $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s 0}$ 是参考最大应变率,单位为 s^{-1} ;

[0073] 确定 $k/\mu b^3$ 、 κ 、 $\hat{\tau}_a$ 、 μ_0 、 D_0 、 T_0 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 g_{0i} 、 $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 p_i 、 q_i 、 $g_{0\varepsilon}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 、 p_ε 、 q_ε 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s 0}$ 、 $g_{\varepsilon s 0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s 0}$ 是机械阈值应力MTS硬化法则需要确定的19个材料参数;

[0074] S82:分别明确近 α 钛合金材料中 α 、 β 相与物理特性相关的参数: μ_0 、 D_0 、 T_0 、 $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 p_i 、 q_i 、 $g_{0\varepsilon}$ 、 p_ε 、 q_ε 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 、 κ 、 k 、 b ,由式(14)计算 μ ,确定 $k/\mu b^3$ 的值;

[0075] S83: $\hat{\tau}_a$ 通过如下公式计算:

$$[0076] \quad \tau_a = \frac{146}{\sqrt{d_{gs}}} \quad (19)$$

[0077] 其中, d_{gs} 表示晶粒尺寸,单位为 μm ;

[0078] S84:近 α 钛合金材料中 α 相的MTS硬化法则参数 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s 0}$ 、 $g_{\varepsilon s 0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s 0}$ 确定步骤如下:

[0079] (1)采用S2中在 $25^\circ C \sim T_{\alpha \rightarrow \beta} + 300^\circ C$ 获得的应力-应变数据,确定 $25^\circ C \sim 250^\circ C$ 温度范围内不同温度、不同应变速率下的屈服应力 τ_{ys} ;

[0080] (2)使用S82、S83、S84(1)确定的参数,利用MATLAB软件,通过式(20)、式(21)进行线性化处理,基于非线性最小二乘法,确定式(22)的斜率 m 及截距 c :

$$[0081] \quad X = \left[\frac{kT}{\mu b^3} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0i}}{\dot{\varepsilon}} \right) \right]^{1/q_i} \quad (20)$$

$$[0082] \quad Y = \left[\frac{\tau_{ys} - \tau_a}{\mu} \right]^{p_i} \quad (21)$$

$$[0083] \quad Y = mX + c \quad (22)$$

[0084] 通过式(23)、式(24)确定 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$:

$$[0085] \quad g_{0i} = - \left(\frac{m}{c} \right)^{-q_i} \quad (23)$$

$$[0086] \quad \hat{\tau}_i = \mu_0 c^{1/p_i} \quad (24)$$

[0087] (3)利用MATLAB/MTEX工具箱获取500个随机取向织构的Bunge Euler角度;

[0088] (4) 确定单调速度梯度L:

$$[0089] \quad \mathbf{L} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\varepsilon}/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\varepsilon}/2 \end{bmatrix} \quad (25)$$

[0090] 其中, $\dot{\varepsilon}$ 是获取S84(1)中确定应力-应变数据时采用的应变速率,当采用单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验时规定 $\dot{\varepsilon}$ 为正值,当采用单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验时规定 $\dot{\varepsilon}$ 为负值;

[0091] (5) 在MATLAB软件中采用信赖域算法,结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,使用S82、S83、S84(2)获得的 α 相的MTS硬化法则参数,以 $\theta_0=1000$ 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}=500$ 、 $g_{\varepsilon s0}=20$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}=1 \times 10^7$ 为初始猜想,以S84(3)的Bunge Euler角度、 $V_T^a=1$ 、 $V_T^b=0$ 、S84(4)中的单调速度梯度、S84(1)中的温度为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入,进行迭代计算;

[0092] (6) 基于非线性最小二乘法,以粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序得到的应力-应变数据与S84(1)中同样温度、应变速率下的实测应力-应变数据差值平方最小为优化目标,确定 α 相的 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 值;

[0093] S85:近 α 钛合金材料中 β 相的MTS硬化法则参数 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 确定步骤如下:

[0094] (1) 采用S2中在室温 $25^\circ\text{C} \sim T_{\alpha \rightarrow \beta} + 300^\circ\text{C}$ 获得的应力-应变数据,确定相变温度 $T_{\alpha \rightarrow \beta}$ 以上温度范围内不同温度、不同应变速率下的屈服应力 τ_{YS} ;

[0095] (2) 使用S82、S83、S85(1)确定的参数,利用MATLAB软件,通过式(20)、式(21)进行线性化处理,基于非线性最小二乘法,确定式(22)的斜率 m 及截距 c ,通过式(23)、式(24)确定 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$;

[0096] (3) 通过式(25)确定单调速度梯度L;

[0097] (4) 在MATLAB软件中采用信赖域算法,结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,使用S82、S83、S85(2)获得的 β 相的MTS硬化法则参数,以 $\theta_0=1000$ 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}=500$ 、 $g_{\varepsilon s0}=20$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}=1 \times 10^7$ 为初始猜想,以S84(3)的Bunge Euler角度、 $V_T^a=0$ 、 $V_T^b=1$ 、S84(4)中的单调速度梯度、S85(1)中的温度为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入,进行迭代计算;

[0098] (5) 基于非线性最小二乘法,以粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序得到的应力-应变数据与S85(1)中同样温度、应变速率下的实测应力-应变数据差值平方最小为优化目标,确定 β 相的 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 值;

[0099] S86:使用S82、S83、S84、S85获得的 α 、 β 相的MTS硬化法则参数,以近 α 型钛合金在S3中热模拟试验的温度、在此温度下由S1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分、S4中热塑性大变形前初始组织的Bunge Euler角度、S7中得到的速度梯度张量值和时间增量为作为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入,进行计算;

[0100] S87:利用MATLA/MTEX将S86计算获得的Bunge Euler角度处理为极图,与S3中获得的热塑性大变形后组织的极图分布趋势与强度对比,确定S84标定的 α 相、S85标定的 β 相的MTS硬化法则参数的准确性。

[0101] S9中建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型,基于近 α 型钛合金的应力-应变数据在有限元软件ABAQUS和粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序中的应用及在两者之间的转换与传递,针对一种近 α 型钛合金不同的热塑性大变形过程,不需要改变S8确定的机械阈值应力MTS硬化法则参数和S6建立的Johnson-Cook子程序。

[0102] S10中进行近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的组织预测具体步骤如下:

[0103] S101:在ABAQUS有限元仿真软件中进行的操作包括:

[0104] (1) 根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情况,使用S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型并验证;

[0105] (2) 使用S6建立的Johnson-Cook子程序进行仿真,利用ABAQUS后处理,选取有限元模型内任意一点进行热塑性大变形过程中速度梯度张量值、时间增量的输出;

[0106] S102:粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入包括:

[0107] (1) 热塑性大变形温度;

[0108] (2) 根据S1计算得到的 α 、 β 相体积分;

[0109] (3) 利用背散射衍射技术EBSD并数据处理后得到的近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始组织的Bunge Euler角度;

[0110] (4) 由S101获得的速度梯度张量值、时间增量;

[0111] S103:S102计算结果的输出文件包含热塑性大变形过程中组织的Bunge Euler角度,通过MATLAB/MTEX后处理获得近 α 型钛合金在此热塑性大变形过程中的组织极图,完成近 α 型钛合金在此热塑性大变形过程中的组织预测。

[0112] 本发明的上述技术方案的有益效果如下:

[0113] 上述方案中,依托于数据流的传递,可对近 α 型钛合金在热塑性大变形中的组织演化行为进行实时预测,全面探索热塑性大变形过程中的塑性变形机制。此方法避免大量繁琐的实验,仅通过简单的实验室试验就可以实现复杂加载路径下的组织预测,模拟结果可靠,可有效减少时间成本和经济成本,有利于优化近 α 型钛合金塑性加工工艺且实现塑性加工产品形-性一体化的目的。

附图说明

[0114] 图1为单轴热模拟压缩试验后试样组织的极图,其中(a)为 α 相,(b)为 β 相;

[0115] 图2为单轴热模拟压缩试验前试样组织的极图,其中(a)为 α 相,(b)为 β 相;

[0116] 图3为VUMAT子程序及速度梯度推导实现流程图;

[0117] 图4为VUMAT子程序接口界面示意图;

[0118] 图5为热模拟压缩试验热-力耦合有限元模型示意图;

[0119] 图6为特征点速度梯度张量值变化示意图;

[0120] 图7为近 α 型钛合金厚板热轧热-力耦合有限元模型示意图;

[0121] 图8为近 α 型钛合金厚板热轧过程中表面组织的极图,其中(a)为 α 相,(b)为 β 相;

[0122] 图9为近 α 型钛合金厚板热轧过程中1/4处组织的极图,其中(a)为 α 相,(b)为 β 相;

[0123] 图10为近 α 型钛合金厚板热轧过程中中心处组织的极图,其中(a)为 α 相,(b)为 β 相;

[0124] 图11为本发明的近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法流程图。

具体实施方式

[0125] 为使本发明要解决的技术问题、技术方案和优点更加清楚,下面将结合附图及具体实施例进行详细描述。

[0126] 本发明提供一种近 α 型钛合金热塑性大变形过程中的组织预测方法。

[0127] 如图11所示,该方法包括步骤如下:

[0128] S1:使用光学显微镜获得近 α 型钛合金材料在不同温度下的金相组织图片,通过ImageJ软件的数字图像处理功能定量分析得到近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数,利用线性插值法获得温度区间内任一温度下近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数;

[0129] S2:根据近 α 型钛合金材料在热塑性大变形时处于的应力状态完成单轴等温恒应变速率热模拟试验,应力状态为拉应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验,应力状态为压应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验,获得钛合金材料在不同温度、不同应变速率下的应力-应变数据;

[0130] S3:选取S2中任意一个已完成热模拟试验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样的图像数据,使用MATLAB/MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形后组织的Bunge Euler角度;

[0131] S4:取和S3中相同但未进行热模拟实验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样在热塑性变形前的图像数据,使用MATLAB/MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形前初始组织的Bunge Euler角度;

[0132] S5:根据S2中获得的应力-应变数据,利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数;

[0133] S6:通过用户子程序接口VUMAT将S5的Johnson-Cook本构方程嵌入ABAQUS有限元软件中,通过数值推导与编程完成位移梯度张量向速度梯度张量的转换,将速度梯度张量值存储在用户子程序接口VUMAT的状态变量中,建立Johnson-Cook子程序;

[0134] S7:根据S3中观测试样在热塑性大变形过程中的几何形状、边界条件、载荷情况,采用S5确定的近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程参数及S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型,利用后处理,获得特征区域内任意一点的速度梯度张量值和时间增量;其中,特征区域为S3中电子背散射衍射技术EBSD观测位置;

[0135] S8:利用MATLAB/MTEX软件,使用随机组织Bunge Euler角度、单调速度梯度、近 α 型钛合金在S2中热模拟试验的温度、在此温度下由S1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分数、S4中热塑性大变形前初始组织的Bunge Euler角度、S7中得到的速度梯度张量值和时间增量数据,以S2中的应力-应变数据、S3中的热塑性大变形后组织的Bunge Euler角度为目标,基于粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数;

[0136] S9:使用S8确定的机械阈值应力MTS硬化法则参数和S6建立的Johnson-Cook子程序,结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型;

[0137] S10:根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情况,使用S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模

型,通过后处理得到的有限元模型内任意一点的速度梯度张量值和时间增量、近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始织构的Bunge Euler角度、变形温度、 α 与 β 相体积分数,作为S9中ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型输入,进行近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的织构预测。

[0138] 下面结合具体实施例予以说明。

[0139] 本实施例以近 α 型钛合金厚板在热轧过程中厚度方向应变不均匀现象为研究对象,具体实施步骤如下:

[0140] 步骤1:使用光学显微镜获得近 α 型钛合金材料在不同温度下的金相组织图片,通过ImageJ软件的数字图像处理功能定量分析得到近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数,利用线性插值法获得温度区间内任一温度下近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数;

[0141] 1.1:在室温25℃到近 α 型钛合金材料的相变温度 $T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 的温度区间中,按150℃间隔确定金相组织观测温度;

[0142] 1.2:使用箱式电阻炉将观测试样加热到1.1确定的金相组织观测温度后,保温10min,随后将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出;

[0143] 1.3:将1.2中试样表面氧化层完全去除,制成金相试样,利用光学显微镜获得金相组织图片。

[0144] 1.4:利用线性插值法获得温度区间内任一温度下近 α 型钛合金中 α 、 β 相体积分数采用如下公式计算:

[0145] 当 $T < T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 时:

$$[0146] \quad \begin{cases} V_T^\alpha = \frac{T-T_2}{T_1-T_2} V_{T_1}^\alpha + \frac{T-T_1}{T_2-T_1} V_{T_2}^\alpha \\ V_T^\beta = 1 - V_T^\alpha \end{cases} \quad (26)$$

[0147] 当 $T \geq T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 时:

$$[0148] \quad V_T^\alpha = 0, V_T^\beta = 1 \quad (27)$$

[0149] 其中, $T_{\alpha\rightarrow\beta}$ 为近 α 型钛合金材料的相变温度; T_1 、 T_2 为1.1中相邻的两个金相组织观测温度; T 表示在区间 $[T_1, T_2]$ 内的任一研究温度,其中 $T < T_{\alpha\rightarrow\beta}$; V_T^α 、 V_T^β 分别表示温度 T 时 α 相体积分数和 β 相体积分数; $V_{T_1}^\alpha$ 、 $V_{T_2}^\alpha$ 分别表示温度 T_1 、 T_2 时 α 相体积分数。

[0150] 步骤2:根据近 α 型钛合金材料在热塑性大变形时处于的应力状态完成单轴等温恒应变速率热模拟试验,应力状态为拉应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验,应力状态为压应力时完成单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验,获得钛合金材料在不同温度、不同应变速率下的应力-应变数据;

[0151] 本实施例根据轧制时材料处于压应力状态选取单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验,具体步骤如下:

[0152] 2.1:试验温度范围为室温25℃到 $T_{\alpha\rightarrow\beta}+300^\circ\text{C}$,每间隔100℃进行应变速率分别为 0.01s^{-1} 、 0.1s^{-1} 、 1s^{-1} 、 10s^{-1} 的单轴等温恒应变速率试验;

[0153] 2.2:单轴等温恒应变速率热模拟试验结束后,将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出作为步骤3中电子背散射衍射技术EBSD观测试样。

[0154] 步骤3:选取步骤2中在温度800℃、应变速率为 0.1s^{-1} 条件下完成热模拟试验的试

样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样的图像数据,使用MATLAB/MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热模拟大变形后织构的Bunge Euler角度,将电子背散射衍射技术EBSD观测位置作为步骤7中的特征区域;

[0155] 热塑性大变形后织构 α 、 β 相的极图如图1所示。

[0156] 步骤4:取和步骤3中相同但未进行热模拟实验的试样,利用电子背散射衍射技术EBSD获得试样在热塑性变形前的图像数据,使用MATLAB/MTEX工具箱进行数据处理,获得试样在热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度,具体步骤如下:

[0157] 4.1:取一近 α 型钛合金试样,使用箱式电阻炉将观测试样加热到步骤3中观测试样的温度后,保温10min;

[0158] 4.2:将试样迅速取出并置于冷水中水淬,待完全冷却后,从水中取出,制成EBSD试样并观测,获取图像数据;

[0159] 热塑性大变形前近 α 型钛合金试样 α 、 β 相的极图如图2所示。

[0160] 步骤5:根据步骤2中获得的应力-应变数据,利用MATLAB确定近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程中的5个参数,具体步骤如下:

[0161] 5.1:采用Johnson-Cook本构方程,应力被定义为应变、应变率和温度的函数:

$$[0162] \quad \sigma = \left(A + B \cdot \varepsilon^n \right) \cdot \left(1 + C \cdot \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) \right) \cdot \left(1 - \left(\frac{T - T_r}{T_m - T_r} \right)^m \right) \quad (28)$$

[0163] 其中: σ 为Von-Mises等效应力; A 为材料在参考温度和参考应变速率下的屈服强度; B 为加工硬化模量; ε 为应变; n 为硬化指数; C 为应变速率常数; $\dot{\varepsilon}$ 为等效塑性应变率; $\dot{\varepsilon}_0$ 为应变速率参考值; m 为热软化常数; T_r 参考温度,取室温 $T_r = 25^\circ\text{C}$; T_m 为材料的熔点温度; T 为试验温度;

[0164] 确定 A 、 B 、 n 、 C 、 m 是Johnson-Cook本构方程需要标定的5个参数;

[0165] 5.2:利用非线性最小二乘法确定5.1中的5个材料参数,优化目标为 S 值最小化:

$$[0166] \quad r_i = \sigma(\varepsilon_i) - \hat{\sigma}(\varepsilon_i) \quad (29)$$

$$[0167] \quad S = \sum_{i=1}^n r_i^2 \quad (30)$$

[0168] 其中, ε_i 代表第 i 个数据点的应变值; $\sigma(\varepsilon_i)$ 代表在应变为 ε_i 时Johnson-Cook本构方程得到的应力值; $\hat{\sigma}(\varepsilon_i)$ 代表在应变为 ε_i 时步骤2中试验获得的应力值; r_i 代表真实应力值 $\hat{\sigma}(\varepsilon_i)$ 与模拟应力值 $\sigma(\varepsilon_i)$ 的残差; S 代表残差 r_i 的平方和。

[0169] 本实例采用的近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程参数如附表1所示。

[0170] 表1近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程参数

[0171]	系数	A	B	n	C	m
	值	1000	198	0.2	0.05	0.8

[0172] 步骤6:通过用户子程序接口VUMAT将步骤5的Johnson-Cook本构方程嵌入ABAQUS有限元软件中,通过数值推导与编程完成位移梯度张量向速度梯度张量的转换,将速度梯度张量值存储在用户子程序接口VUMAT的状态变量中,建立Johnson-Cook子程序,具体步骤

如下:

[0173] 6.1:在连续介质力学中,变形梯度张量 $\mathbf{F}$ 和速度梯度张量 $\mathbf{L}$ 描述如下:

$$[0174] \quad \mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} \quad (31)$$

$$[0175] \quad \mathbf{L} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{X}} \frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \mathbf{x}} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \quad (32)$$

$$[0176] \quad \mathbf{v} = \dot{\mathbf{x}} \quad (33)$$

[0177] 其中, $\dot{\mathbf{x}}$ 表示 $\mathbf{x}$ 对时间的导数; $\mathbf{x}$ 为质点的空间坐标,即当前构形; $\mathbf{X}$ 为质点的物质坐标,即参考构形; $\mathbf{v}$ 是在空间坐标 $\mathbf{x}$ 下质点变形后的速度;

[0178] 由式(7)经过数学变换得变形梯度的速率方程:

$$[0179] \quad \dot{\mathbf{F}} = \mathbf{L} \mathbf{F} \quad (34)$$

[0180] 在时间间隔 $[t_n, t_{n+1}]$ 中,假设 t_n 时刻下材料的状态变量,需求解时间增量 Δt 后,即在时刻 t_{n+1} 下的新状态;

[0181] 对式(9)进行全隐式时间积分,得:

$$[0182] \quad \mathbf{F}_{n+1} = \exp(\Delta t \mathbf{L}_{n+1}) \mathbf{F}_n \quad (35)$$

[0183] 指数形式的式(10)可以用一阶泰勒展开式近似表达:

$$[0184] \quad \mathbf{F}_{n+1} \approx (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{L}_{n+1}) \mathbf{F}_n \quad (36)$$

[0185] 其中 $\mathbf{I}$ 是单位张量;

[0186] 将式(11)经过数学变换得速度梯度张量 $\mathbf{L}_{n+1}$ 的求解公式:

$$[0187] \quad \mathbf{L}_{n+1} = (\mathbf{F}_{n+1} \mathbf{F}_n^{-1} - \mathbf{I}) / \Delta t \quad (37)$$

[0188] 6.2:遵守用户子程序接口VUMAT的书写格式,利用主程序向用户子程序接口VUMAT提供的时间增量步 Δt 及其前后的变形梯度张量 $\mathbf{F}_n$ 、 $\mathbf{F}_{n+1}$,在用户子程序接口VUMAT分别用固定名称`dt`、`defgradOld`、`defgradNew`表示,采用Fortran语言对公式(12)进行程序编写计算速度梯度张量 $\mathbf{L}_{n+1}$;

[0189] VUMAT实现流程图、子程序接口界面分别如图3、图4所示。

[0190] 步骤7:根据步骤3中观测试样在热塑性大变形过程中的几何形状、边界条件、载荷情况,采用步骤5确定的近 α 型钛合金材料的Johnson-Cook本构方程参数及步骤6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型,如图5所示;

[0191] 利用后处理,获得特征区域内任意一点的速度梯度张量值和时间增量,如图6所示。

[0192] 步骤8:利用MATLAB/MTEX软件,使用随机织构Bunge Euler角度、单调速度梯度、近 α 型钛合金在步骤2中热模拟试验的温度、在此温度下由步骤1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分、步骤4中热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度、步骤7中得到的速度梯度张量值和时间增量等数据,以步骤2中的应力-应变数据、步骤3中的热塑性大变形后织构的Bunge Euler角度为目标,基于粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,确定机械阈值应力MTS硬化法则中的19个参数,具体步骤如下:

[0193] 8.1:粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序中基于变形物理机制的机械阈值应力MTS硬化法则:

$$[0194] \quad \frac{\tau_c}{\mu} = \frac{\hat{\tau}_a}{\mu} + S_i(\dot{\varepsilon}, T) \frac{\hat{\tau}_i}{\mu_0} + S_\varepsilon(\dot{\varepsilon}, T) \frac{\hat{\tau}_\varepsilon}{\mu_0} \quad (38)$$

$$[0195] \quad \mu = \mu_0 - \frac{D_0}{\exp\left(\frac{T_0}{T}\right) - 1} \quad (39)$$

$$[0196] \quad S_i(\dot{\varepsilon}, T) = \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\mu b^3 g_{0i}} \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0i}}{\dot{\varepsilon}}\right) \right]^{1/q_i} \right\}^{1/p_i} \quad (40)$$

$$[0197] \quad S_\varepsilon(\dot{\varepsilon}, T) = \left\{ 1 - \left[\frac{kT}{\mu b^3 g_{0\varepsilon}} \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}}\right) \right]^{1/q_\varepsilon} \right\}^{1/p_\varepsilon} \quad (41)$$

[0198] 其中, τ_c 是流动应力; $\hat{\tau}_a$ 表征位错与长程障碍 (如晶界) 的相互作用, 单位为 MPa; $\hat{\tau}_i$ 为由于间隙原子或溶质的相互作用而产生的热应力分量, $\hat{\tau}_\varepsilon$ 为由于可移动位错和林位错之间的相互作用而产生的热应力分量; μ 为剪切模量; $S_i(\dot{\varepsilon}, T)$ 和 $S_\varepsilon(\dot{\varepsilon}, T)$ 是描述温度和应变速率相关性对流动应力影响的系数; $\dot{\varepsilon}$ 为应变速率; T 为试验温度; μ_0 为参考剪切模量, 单位为 MPa; T_0 为参考温度, 单位为 K; D_0 为标度常数; $\dot{\varepsilon}$ 表示等效应变速率; g_{0i} 、 $g_{0\varepsilon}$ 表示克服障碍进行位错运动所需的归一化活化能; $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 表示参考应变率, 单位为 s^{-1} ; 常数 p ($0 \leq p_i \leq 1$ 、 $0 \leq p_\varepsilon \leq 1$)、 q ($1 \leq q_i \leq 2$ 、 $1 \leq q_\varepsilon \leq 2$) 描述位错运动遇到的障碍物形状; k 表示 Boltzmann 常数; b 表示 burgers 矢量的大小;

[0199] $\hat{\tau}_\varepsilon$ 遵循以下演化规律:

$$[0200] \quad \frac{d\hat{\tau}_\varepsilon}{d\varepsilon} = \theta_0 \frac{\mu}{\mu_0} \left[1 - \frac{\hat{\tau}_\varepsilon}{\hat{\tau}_{\varepsilon s}} \right]^\kappa \quad (42)$$

$$[0201] \quad \ln\left(\frac{\hat{\tau}_{\varepsilon s}}{\hat{\tau}_{\varepsilon s0}}\right) = \frac{kT}{\mu b^3 g_{0\varepsilon s}} \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}}\right) \quad (43)$$

[0202] 其中, θ_0 为初始硬化率, κ 是根据材料力学特性获得的常数; $\hat{\tau}_{\varepsilon s}$ 是饱和应力值; $g_{0\varepsilon s}$ 是相关归一化活化能; $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 表示参考饱和应力值, 单位为 MPa; $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 是参考最大应变率, 单位为 s^{-1} ;

[0203] 确定 $k/\mu b^3$ 、 κ 、 $\hat{\tau}_a$ 、 μ_0 、 D_0 、 T_0 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 g_{0i} 、 $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 p_i 、 q_i 、 $g_{0\varepsilon}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 、 p_ε 、 q_ε 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 是机械阈值应力 MTS 硬化法则需要确定的 19 个材料参数;

[0204] 8.2: 分别明确近 α 钛合金材料中 α 、 β 相与物理特性相关的参数: μ_0 、 D_0 、 T_0 、 $\dot{\varepsilon}_{0i}$ 、 p_i 、 q_i 、 $g_{0\varepsilon}$ 、 p_ε 、 q_ε 、 $\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$ 、 κ 、 k 、 b , 由式 (14) 计算 μ , 确定 $k/\mu b^3$ 的值;

[0205] 8.3: $\hat{\tau}_a$ 通过如下公式计算:

$$[0206] \quad \tau_a = \frac{146}{\sqrt{d_{gs}}} \quad (44)$$

[0207] 其中, d_{gs} 表示晶粒尺寸, 单位为 μm ;

[0208] 8.4: 近 α 钛合金材料中 α 相的 MTS 硬化法则参数 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 确定步骤如下:

[0209] (1) 采用步骤2中在 $25^\circ\text{C} \sim T_{\alpha \rightarrow \beta} + 300^\circ\text{C}$ 获得的应力-应变数据, 确定 $25^\circ\text{C} \sim 250^\circ\text{C}$ 温度范围内不同温度、不同应变速率下的屈服应力 τ_{YS} ;

[0210] (2) 使用8.2、8.3、8.4 (1) 确定的参数, 利用MATLAB软件, 通过式 (20)、式 (21) 进行线性化处理, 基于非线性最小二乘法, 确定式 (22) 的斜率 m 及截距 c :

$$[0211] \quad X = \left[\frac{kT}{\mu b^3} \ln \left(\frac{\dot{\varepsilon}_{0i}}{\dot{\varepsilon}} \right) \right]^{1/q_i} \quad (45)$$

$$[0212] \quad Y = \left[\frac{\tau_{YS} - \tau_a}{\mu} \right]^{p_i} \quad (46)$$

$$[0213] \quad Y = mX + c \quad (47)$$

[0214] 通过式 (23)、式 (24) 确定 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$:

$$[0215] \quad g_{0i} = - \left(\frac{m}{c} \right)^{-q_i} \quad (48)$$

$$[0216] \quad \hat{\tau}_i = \mu_0 c^{1/p_i} \quad (49)$$

[0217] (3) 利用MATLAB/MTEX工具箱获取500个随机取向织构的Bunge Euler角度;

[0218] (4) 确定单调速度梯度 L :

$$[0219] \quad L = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\varepsilon}/2 & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\varepsilon}/2 \end{bmatrix} \quad (50)$$

[0220] 其中, $\dot{\varepsilon}$ 是获取8.4 (1) 中确定应力-应变数据时采用的应变速率, 当采用单轴等温恒应变速率热模拟拉伸试验时规定 $\dot{\varepsilon}$ 为正值, 当采用单轴等温恒应变速率热模拟压缩试验时规定 $\dot{\varepsilon}$ 为负值;

[0221] (5) 在MATLAB软件中采用信赖域算法, 结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序, 使用8.2、8.3、8.4 (2) 获得的 α 相的 MTS 硬化法则参数, 以 $\theta_0 = 1000$ 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0} = 500$ 、 $g_{\varepsilon s0} = 20$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0} = 1 \times 10^7$ 为初始猜想, 以8.4 (3) 的Bunge Euler角度、 $V_T^a = 1$ 、 $V_T^b = 0$ 、8.4 (4) 中的单调速度梯度、8.4 (1) 中的温度为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入, 进行迭代计算;

[0222] (6) 基于非线性最小二乘法, 以粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序得到的应力-应变数据与8.4 (1) 中同样温度、应变速率下的实测应力-应变数据差值平方最小为优化目标, 确定 α 相的 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 值;

[0223] 8.5: 近 α 钛合金材料中 β 相的 MTS 硬化法则参数 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$ 、 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 确定步骤如下:

[0224] (1) 采用步骤2中在室温 $25^\circ\text{C} \sim T_{\alpha \rightarrow \beta} + 300^\circ\text{C}$ 获得的应力-应变数据, 确定相变温度 $T_{\alpha \rightarrow \beta}$ 以上温度范围内不同温度、不同应变速率下的屈服应力 τ_{YS} ;

[0225] (2) 使用8.2、8.3、8.5(1)确定的参数,利用MATLAB软件,通过式(20)、式(21)进行线性化处理,基于非线性最小二乘法,确定式(22)的斜率 m 及截距 c ,通过式(23)、式(24)确定 g_{0i} 、 $\hat{\tau}_i$;

[0226] (3)通过式(25)确定单调速度梯度 L ;

[0227] (4) 在MATLAB软件中采用信赖域算法,结合粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序,使用8.2、8.3、8.5(2)获得的 β 相的MTS硬化法则参数,以 $\theta_0=1000$ 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}=500$ 、 $g_{\varepsilon s0}=20$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}=1 \times 10^7$ 为初始猜想,以8.4(3)的Bunge Euler角度、 $V_T^\alpha=0$ 、 $V_T^\beta=1$ 、8.4(4)中的单调速度梯度、8.5(1)中的温度为粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入,进行迭代计算;

[0228] (5) 基于非线性最小二乘法,以粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序得到的应力-应变数据与S85(1)中同样温度、应变速率下的实测应力-应变数据差值平方最小为优化目标,确定 β 相的 θ_0 、 $\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$ 、 $g_{\varepsilon s0}$ 、 $\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$ 值;

[0229] 8.6:使用8.2、8.3、8.4、8.5获得的 α 、 β 相的MTS硬化法则参数,以近 α 型钛合金在步骤3中热模拟试验的温度、在此温度下由步骤1观测结果计算得到的 α 、 β 相体积分、步骤4中热塑性大变形前初始织构的Bunge Euler角度、步骤7中得到的速度梯度张量值、时间增量为作为粘塑性自洽模型VPSC的数值计算程序的输入,进行计算;

[0230] 通过公式(2),计算得到试验采用的近 α 钛合金在 800°C 时 $V_{T=320^\circ\text{C}}^\alpha=0.9$ 、 $V_{T=320^\circ\text{C}}^\beta=0.1$;

[0231] 8.7:利用MATLA/MTEX将8.6计算获得的Bunge Euler角度处理为极图,与步骤3中获得的热塑性大变形后织构的极图分布趋势与强度对比,确定8.4标定的 α 相、8.5标定的 β 相的MTS硬化法则参数的准确性;

[0232] 得到的 α 、 β 相MTS硬化法则参数如附表2所示。

[0233] 表2近 α 型钛合金MTS硬化法则参数

	序号	系数	α 相	β 相
[0234]	1	$k/\mu b^3$	0.5721	0.377
	2	κ	2.55	2.0
	3	$\hat{\tau}_a$	33	2.0
	4	μ_0	48516.3	47620
	5	D_0	0.057	0.122
	6	T_0	98.7	500
	7	$\hat{\tau}_i$	519	255.2
	8	θ_0	5010	1000
	9	g_{0i}	4.79	0.32
	10	$\dot{\varepsilon}_{0i}$	1×10^7	1×10^5
	11	p_i	1.78	0.5
	12	q_i	1.89	1.5
	13	$g_{0\varepsilon}$	1.6	1.6
[0235]	14	$\dot{\varepsilon}_{0\varepsilon}$	1×10^7	1×10^7
	15	p_ε	3.69	0.667
	16	q_ε	0.05	1.0
	17	$\hat{\tau}_{\varepsilon s0}$	416	340.2
	18	$g_{\varepsilon s0}$	83	0.057
	19	$\dot{\varepsilon}_{\varepsilon s0}$	1×10^7	1×10^6

[0236] 步骤9:使用步骤8确定的机械阈值应力MTS硬化法则参数和步骤6建立的Johnson-Cook子程序VUMAT,结合粘塑性自洽模型VPSC的数值计算程序,建立ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型;

[0237] 步骤10:针对不同的热塑性大变形过程,根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情况,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型,通过后处理得到的有限元模型内任意一点的速度梯度张量值和时间增量、近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始织构的Bunge Euler角度、变形温度、 α 与 β 相体积分数,作为步骤9中ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型输入,进行近 α 型钛合金在不同热塑性大变形过程中的织构预测,具体步骤如下:

[0238] 10.1:在ABAQUS有限元仿真软件中进行的操作包括:

[0239] (1) 根据近 α 型钛合金在不同的热塑性大变形过程的几何形状、边界条件、载荷情

况,使用S6建立的Johnson-Cook子程序,在ABAQUS有限元软件中建立动力显式仿真分析模型并验证;

[0240] (2) 使用步骤6建立的Johnson-Cook子程序进行仿真,利用ABAQUS后处理,选取有限元模型内任意一点进行热塑性大变形过程中速度梯度张量值、时间增量的输出;

[0241] 10.2:粘塑性自洽模型VPSC数值计算程序的输入包括:

[0242] (1) 热塑性大变形温度;

[0243] (2) 根据步骤1计算得到的 α 、 β 相体积分数;

[0244] (3) 利用背散射衍射技术EBSD并数据处理后得到的近 α 型钛合金未发生塑性变形前初始组织的Bunge Euler角度;

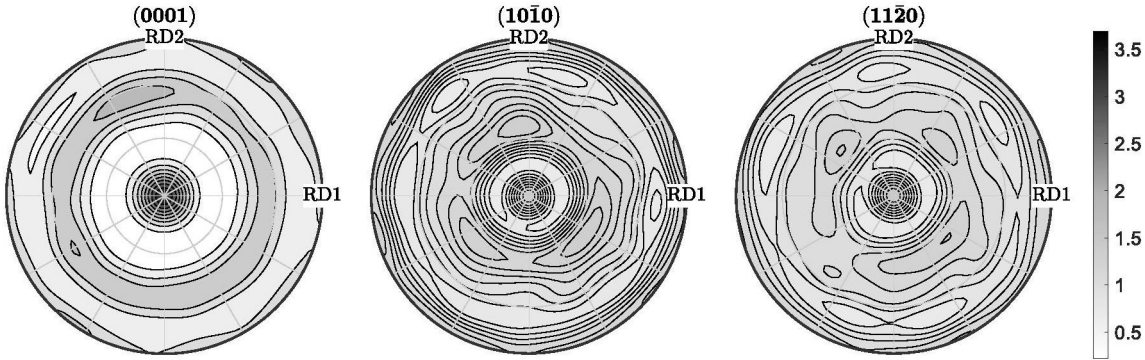
[0245] (4) 由10.1获得的速度梯度张量值、时间增量;

[0246] 10.3:10.2计算结果的输出文件包含热塑性大变形过程中组织的Bunge Euler角度,通过MATLAB/MTEX后处理获得近 α 型钛合金在此热塑性大变形过程中的组织极图,完成近 α 型钛合金在此热塑性大变形过程中的组织预测。

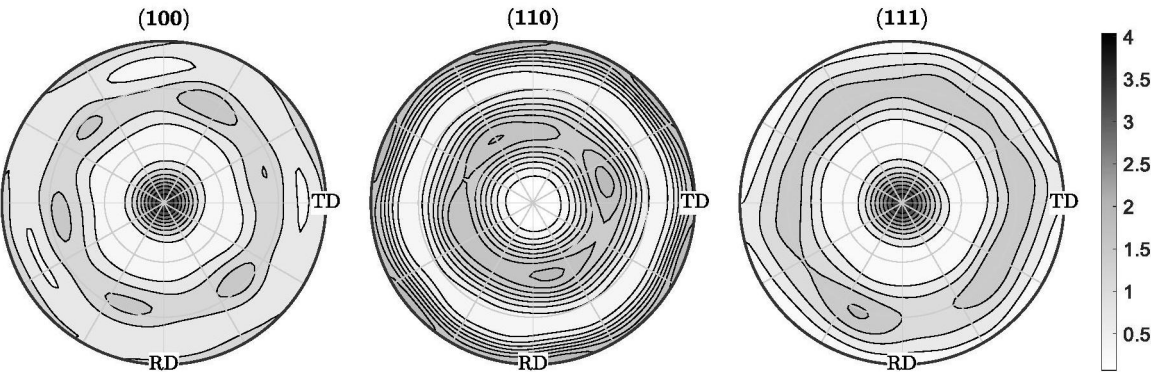
[0247] 利用建立的ABAQUS-VPSC-MTS多尺度模型,建立了近 α 型钛合金热轧过程的有限元仿真分析模型,如图7所示;

[0248] 研究了近 α 型钛合金在温度为 900°C 、 $V^{\alpha}=0.8$, $V^{\beta}=0.2$ 的条件下,热轧过程中厚度方向上不同位置处的组织演化情况,如图8、图9、图10所示。

[0249] 以上所述是本发明的优选实施方式,应当指出,对于本技术领域的普通技术人员来说,在不脱离本发明所述原理的前提下,还可以做出若干改进和润饰,这些改进和润饰也应视为本发明的保护范围。

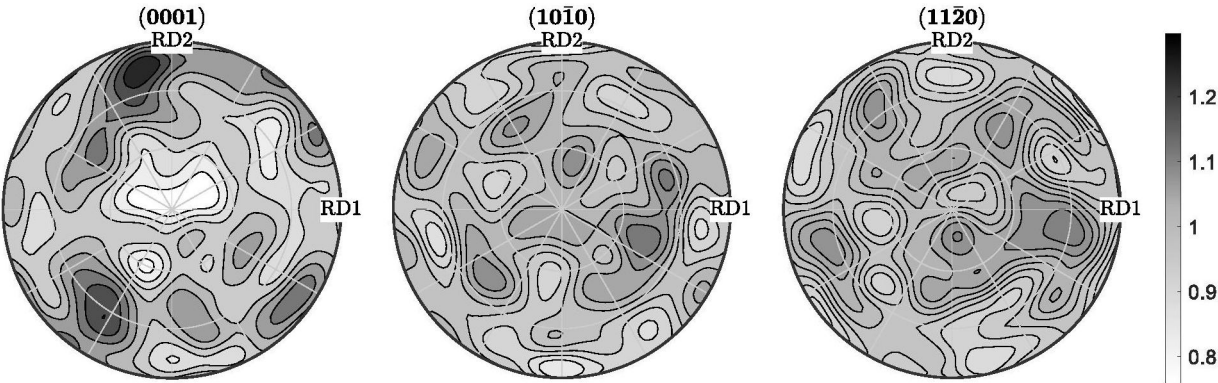


(a)

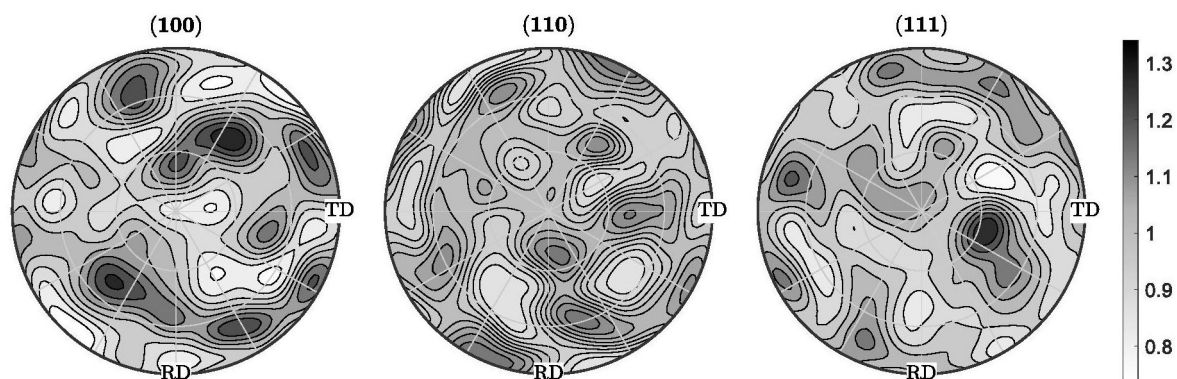


(b)

图1



(a)



(b)

图2

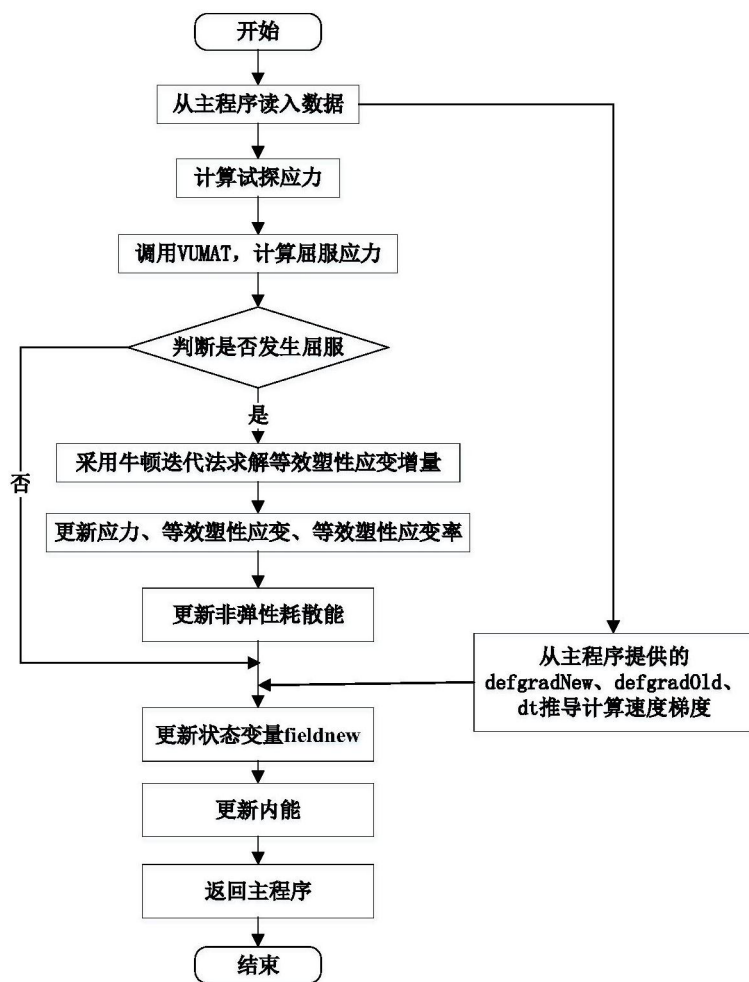


图3

```

subroutine vumat(
C  只读变量，用于从主程序传递数据给子程序，子程序不能修改
1  nblock, ndir, nshr, nstatev, nfieldv, nprops, lanneal,
2  stepTime, totalTime, dt, cmname, coordMp, charLength,
3  props, density, strainInc, relSpinInc,
4  tempOld, stretchOld, defgradOld, fieldOld,
5  stressOld, stateOld, enerInternOld, enerInelasOld,
6  tempNew, stretchNew, defgradNew, fieldNew,
C  只写变量，由子程序计算，并传给主程序使用
7  stressNew, stateNew, enerInternNew, enerInelasNew)
C  包含ABAQUS默认数据变量库
include 'vaba_param.inc'
C  定义用于主、子程序间传递数据的变量数组
dimension props(nprops), density(nblock), coordMp(nblock,*),
1  charLength(nblock), strainInc(nblock, ndir+nshr),
2  relSpinInc(nblock, nshr), tempOld(nblock),
3  stretchOld(nblock, ndir+nshr),
4  defgradOld(nblock, ndir+nshr+nshr),
5  fieldOld(nblock, nfieldv), stressOld(nblock, ndir+nshr),
6  stateOld(nblock, nstatev), enerInternOld(nblock),
7  enerInelasOld(nblock), tempNew(nblock),
8  stretchNew(nblock, ndir+nshr),
9  defgradNew(nblock, ndir+nshr+nshr),
1  fieldNew(nblock, nfieldv),
2  stressNew(nblock, ndir+nshr), stateNew(nblock, nstatev),
3  enerInternNew(nblock), enerInelasNew(nblock)
C  定义存放材料名的字符串
character*80 cmname

```

图4

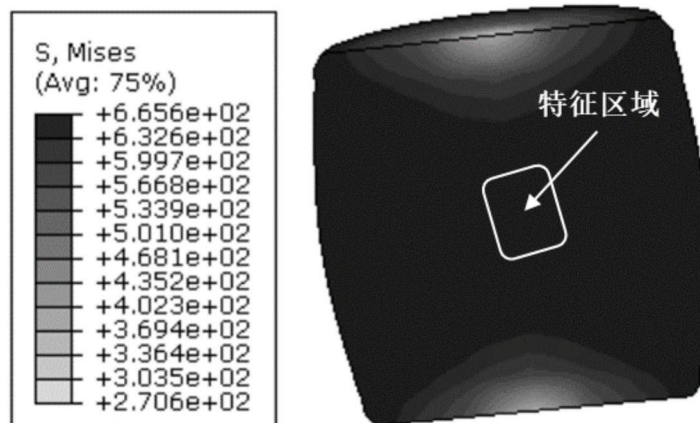


图5

step	L11	L12	L13	L21	L22	L23	L31	L32	L33	tincr
1	-1.0413e-02	-1.1752e-01	5.8163e-04	-8.6121e-03	9.3315e-02	-9.2978e-04	5.4244e-04	-1.2676e-02	-1.4545e-02	0.0000e+00
2	-1.0413e-02	-1.1752e-01	5.8162e-04	-8.6121e-03	9.3314e-02	-9.2978e-04	5.4244e-04	-1.2676e-02	-1.4545e-02	0.0000e+00
3	-1.0413e-02	-1.1752e-01	5.8162e-04	-8.6121e-03	9.3313e-02	-9.2978e-04	5.4244e-04	-1.2676e-02	-1.4545e-02	1.5000e-05
4	-1.0413e-02	-1.1752e-01	5.8161e-04	-8.6121e-03	9.3311e-02	-9.2978e-04	5.4243e-04	-1.2676e-02	-1.4545e-02	2.2500e-05
5	-1.0412e-02	-1.1752e-01	5.8160e-04	-8.6121e-03	9.3309e-02	-9.2978e-04	5.4242e-04	-1.2675e-02	-1.4545e-02	3.3750e-05
6	-1.0412e-02	-1.1751e-01	5.8159e-04	-8.6121e-03	9.3305e-02	-9.2978e-04	5.4241e-04	-1.2675e-02	-1.4544e-02	5.0625e-05
7	-1.0411e-02	-1.1751e-01	5.8157e-04	-8.6121e-03	9.3300e-02	-9.2979e-04	5.4239e-04	-1.2674e-02	-1.4543e-02	7.5937e-05
8	-1.0410e-02	-1.1749e-01	5.8154e-04	-8.6121e-03	9.3292e-02	-9.2980e-04	5.4235e-04	-1.2673e-02	-1.4542e-02	1.1391e-04
9	-1.0409e-02	-1.1748e-01	5.8149e-04	-8.6122e-03	9.3279e-02	-9.2981e-04	5.4231e-04	-1.2671e-02	-1.4540e-02	1.7086e-04
10	-1.0406e-02	-1.1746e-01	5.8143e-04	-8.6122e-03	9.3261e-02	-9.2983e-04	5.4224e-04	-1.2669e-02	-1.4538e-02	2.5629e-04
11	-1.0403e-02	-1.1742e-01	5.8132e-04	-8.6123e-03	9.3234e-02	-9.2986e-04	5.4213e-04	-1.2665e-02	-1.4534e-02	3.8443e-04
12	-1.0398e-02	-1.1737e-01	5.8117e-04	-8.6124e-03	9.3193e-02	-9.2990e-04	5.4197e-04	-1.2659e-02	-1.4528e-02	5.7665e-04
13	-1.0390e-02	-1.1729e-01	5.8094e-04	-8.6126e-03	9.3131e-02	-9.2996e-04	5.4173e-04	-1.2651e-02	-1.4519e-02	8.6498e-04
14	-1.0381e-02	-1.1718e-01	5.8059e-04	-8.6124e-03	9.3051e-02	-9.2997e-04	5.4139e-04	-1.2639e-02	-1.4507e-02	1.0000e-03
15	-1.0371e-02	-1.1707e-01	5.8020e-04	-8.6117e-03	9.2965e-02	-9.2995e-04	5.4100e-04	-1.2627e-02	-1.4494e-02	1.0000e-03
16	-1.0361e-02	-1.1696e-01	5.7980e-04	-8.6111e-03	9.2878e-02	-9.2993e-04	5.4062e-04	-1.2615e-02	-1.4482e-02	1.0000e-03
17	-6.3737e-04	-7.1916e-03	3.5855e-05	-5.2928e-04	5.7120e-03	-5.7368e-05	3.3165e-05	-7.7637e-04	-8.9051e-04	1.0000e-03
18	-3.6737e-04	-4.1546e-03	1.9826e-05	-3.0522e-04	3.2977e-03	-3.2403e-05	1.9110e-05	-4.4670e-04	-5.1447e-04	1.0000e-03
19	-3.4598e-04	-3.9216e-03	1.9817e-05	-2.8663e-04	3.1104e-03	-3.0747e-05	1.8287e-05	-4.2281e-04	-4.8585e-04	1.0000e-03
20	-3.2554e-04	-3.6979e-03	1.9014e-05	-2.6963e-04	2.9313e-03	-2.9083e-05	1.7314e-05	-3.9782e-04	-4.5815e-04	1.0000e-03
21	-3.1304e-04	-3.5461e-03	1.7425e-05	-2.5934e-04	2.8121e-03	-2.7662e-05	1.7557e-05	-3.8400e-04	-4.3894e-04	1.0000e-03
22	-3.0294e-04	-3.4224e-03	1.8193e-05	-2.5069e-04	2.7159e-03	-2.7828e-05	1.5512e-05	-3.6915e-04	-4.2384e-04	1.0000e-03
23	-2.9019e-04	-3.2910e-03	1.6185e-05	-2.4069e-04	2.6099e-03	-2.6108e-05	1.5524e-05	-3.5591e-04	-4.0742e-04	1.0000e-03
24	-2.8002e-04	-3.1766e-03	1.5525e-05	-2.3086e-04	2.5170e-03	-2.5789e-05	1.4372e-05	-3.4395e-04	-3.9346e-04	1.0000e-03
25	-2.6645e-04	-3.0564e-03	1.5959e-05	-2.2248e-04	2.4165e-03	-2.3998e-05	1.4739e-05	-3.2971e-04	-3.7877e-04	1.0000e-03
26	-2.5298e-04	-2.9418e-03	1.5470e-05	-2.1200e-04	2.3173e-03	-2.3024e-05	1.3996e-05	-3.1763e-04	-3.6493e-04	1.0000e-03
27	-2.4564e-04	-2.8593e-03	1.5114e-05	-2.0591e-04	2.2516e-03	-2.2314e-05	1.3658e-05	-3.0852e-04	-3.5465e-04	1.0000e-03
28	-2.3897e-04	-2.7814e-03	1.4700e-05	-2.0031e-04	2.1903e-03	-2.1711e-05	1.3276e-05	-3.0012e-04	-3.4498e-04	1.0000e-03
29	-2.3267e-04	-2.6997e-03	1.5395e-05	-1.9545e-04	2.1281e-03	-2.1548e-05	1.0760e-05	-2.8641e-04	-3.3538e-04	1.0000e-03
30	-2.2720e-04	-2.6013e-03	1.4969e-05	-1.9046e-04	2.0593e-03	-2.0764e-05	1.1404e-05	-2.7852e-04	-3.2332e-04	1.0000e-03
31	-2.2075e-04	-2.5248e-03	1.2111e-05	-1.8368e-04	1.9977e-03	-2.0042e-05	1.3182e-05	-2.7727e-04	-3.1256e-04	1.0000e-03
32	-2.1476e-04	-2.4562e-03	1.1774e-05	-1.7863e-04	1.9435e-03	-1.9507e-05	1.2868e-05	-2.6991e-04	-3.0404e-04	1.0000e-03
33	-2.0864e-04	-2.3860e-03	1.1751e-05	-1.7427e-04	1.8889e-03	-1.8849e-05	1.1337e-05	-2.5816e-04	-2.9579e-04	1.0000e-03
34	-2.0168e-04	-2.3078e-03	1.2041e-05	-1.6979e-04	1.8280e-03	-1.8434e-05	0.0000e+00	-2.4378e-04	-2.8663e-04	1.0000e-03

图6

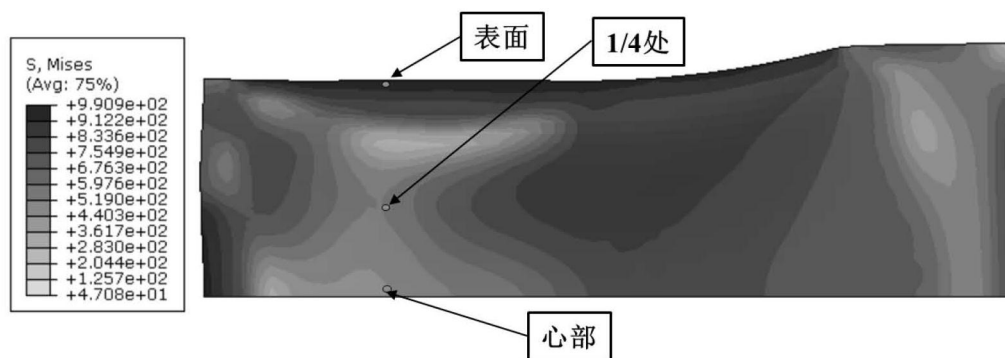
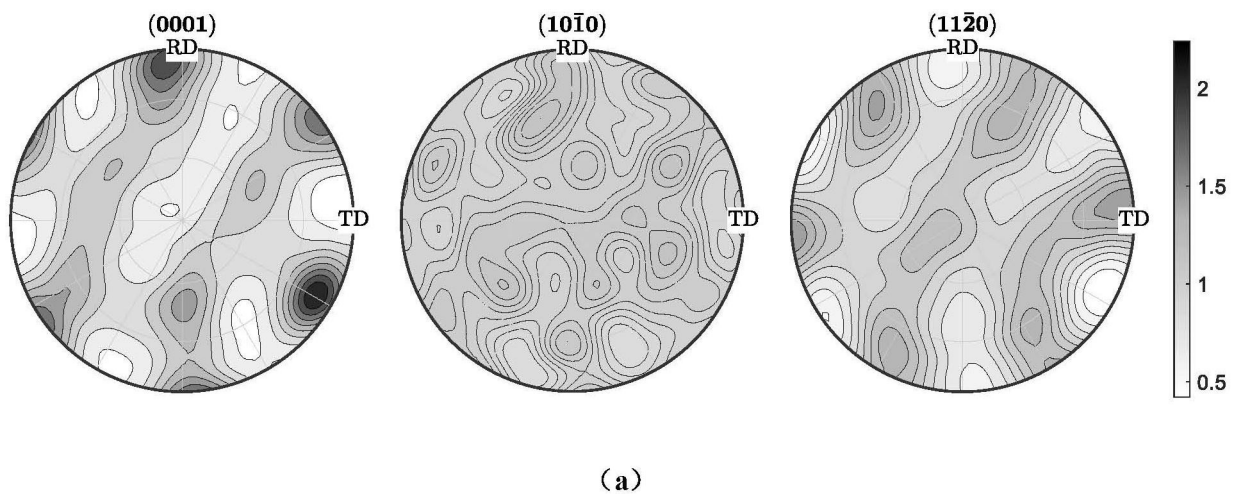


图7



(a)

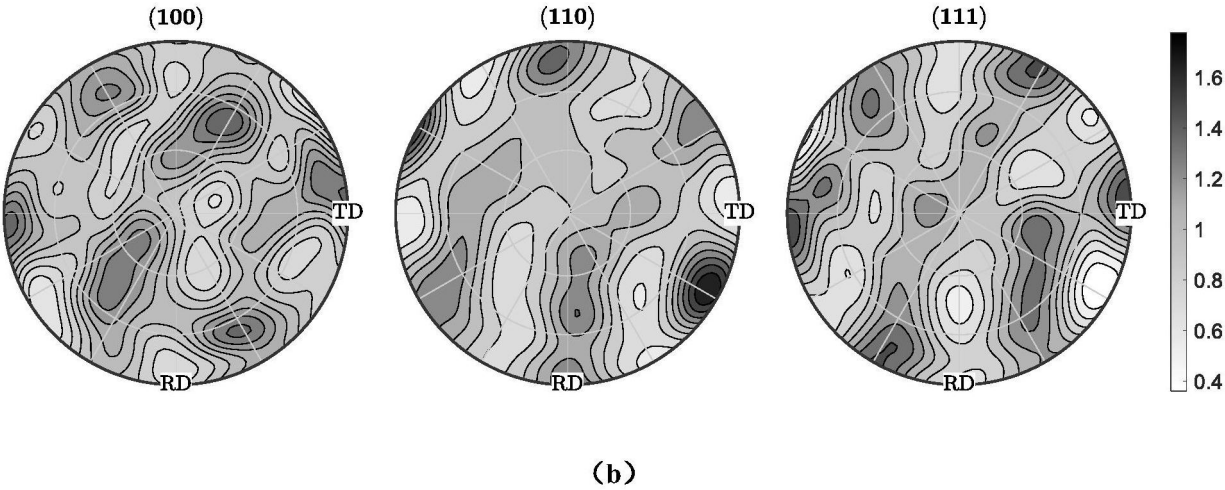


图8

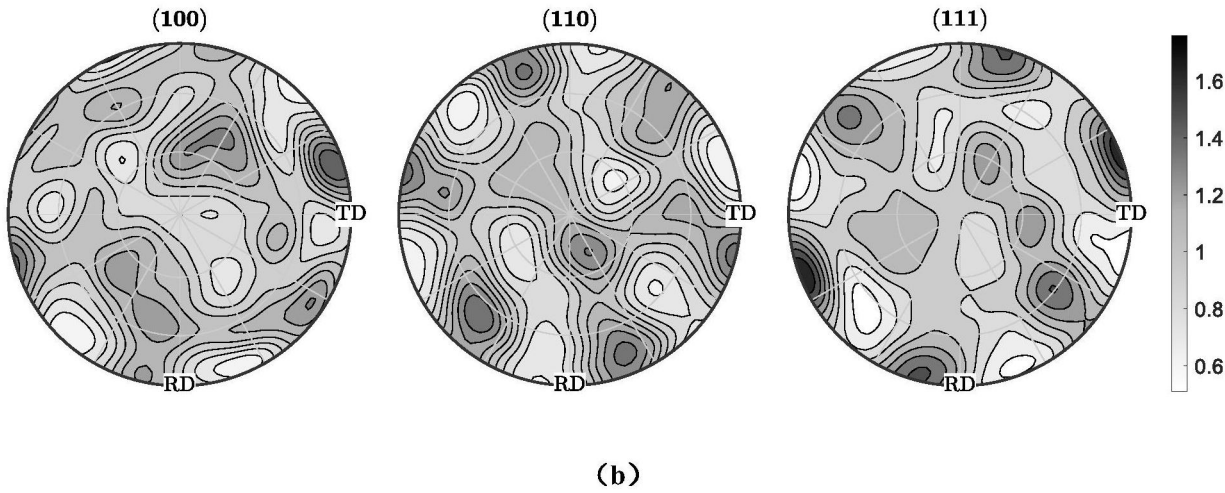
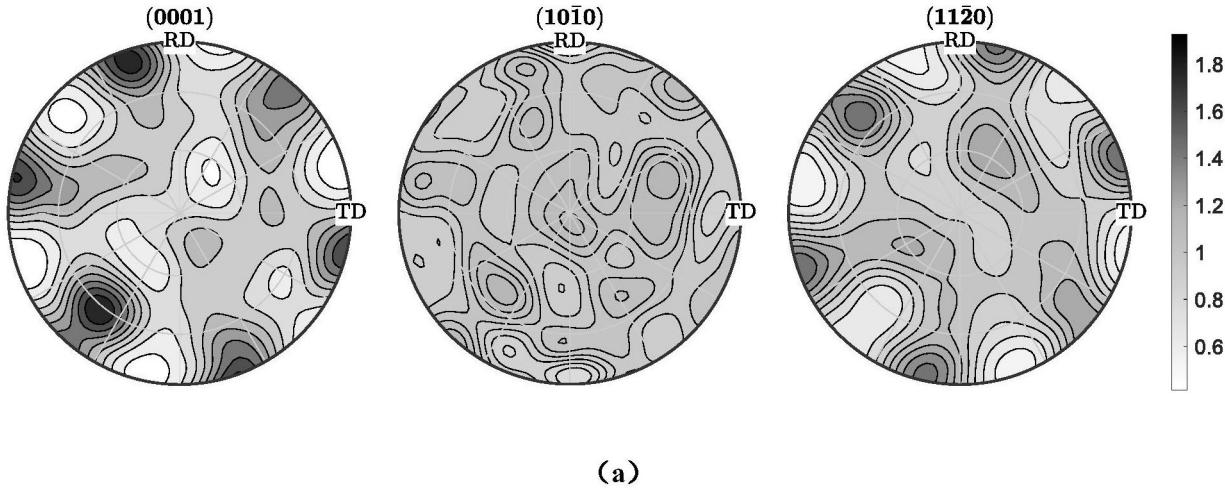
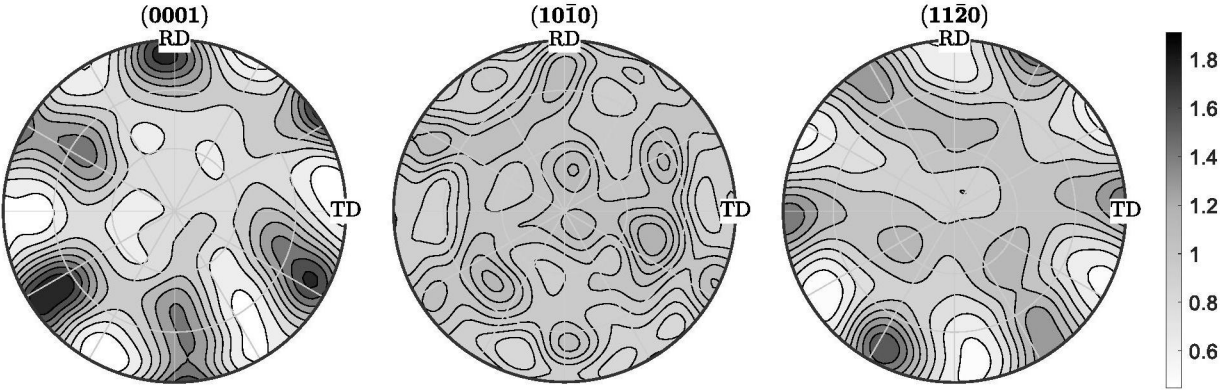
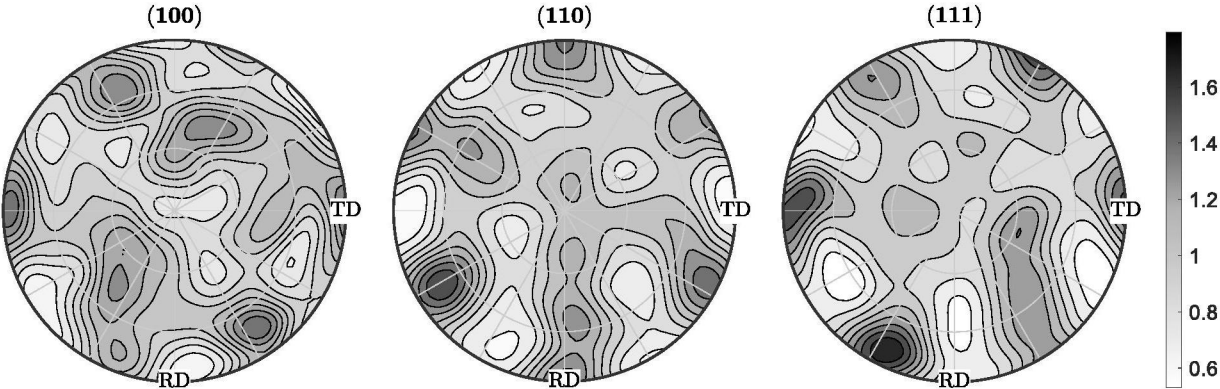


图9



(a)



(b)

图10

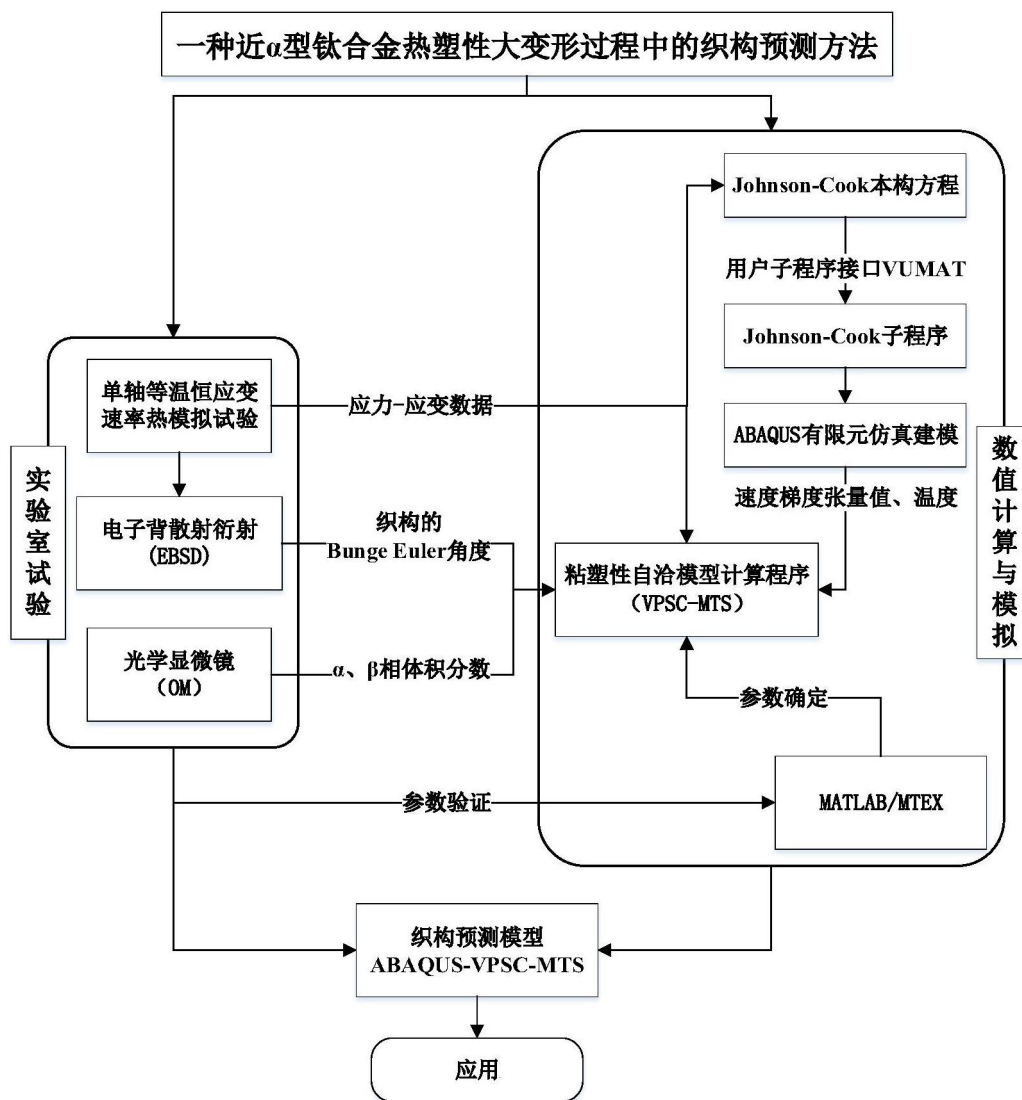


图11