

铸态 TiZrNbV 晶体塑性本构模型的 参数分析与参数反演*

马培源, 林玉亮, 陈荣

(国防科技大学 理学院, 长沙 410073)

摘要: 难熔高熵合金因其卓越的力学性能而备受关注,但其细观特征行为对其宏观力学行为的影响尚未被充分理解.随着对材料细观力学行为研究需求的增加,晶体塑性有限元方法已成为揭示晶体材料细观机制的关键工具.由于晶体塑性本构模型包含众多复杂参数,深入分析这些参数对于理解合金的细观力学行为至关重要.研究中采用的晶体塑性本构模型考虑了 Peierls 应力,这一因素能够反映材料的短程势垒,从而更准确地模拟材料的应变率行为.通过试验设计和极差分析,识别了影响合金力学性能的关键本构参数.单因素分析明确了关键参数对材料力学特性的具体影响.在参数反演方面,提出了一种基于优化设计的参数反演方法,该方法结合支持向量回归法和优化算法,能够有效地从宏观力学测试数据中反演出晶体塑性本构参数.针对铸态 TiZrNbV 合金,成功反演出一组最优参数,仿真与试验的一致性验证了该方法的有效性.研究为难熔高熵合金的力学行为预测、材料设计以及性能优化提供了有力的支撑.

关键词: 难熔高熵合金; 晶体塑性理论; 参数反演; 优化设计

中图分类号: O341 **文献标志码:** A **DOI:** 10.21656/1000-0887.450264

Parametric Analysis and Parameter Inversion of the Crystal Plasticity Constitutive Model for as-Cast TiZrNbV Refractory High Entropy Alloys

MA Peiyuan, LIN Yuliang, CHEN Rong

(College of Science, National University of Defense Technology,
Changsha 410073, P.R.China)

Abstract: Refractory high-entropy alloys (RHEAs) have attracted considerable attention due to their outstanding mechanical properties. However, the influence of their microstructural behavior on macroscopic mechanical performance remains poorly understood. With the increase of study on material micromechanical behaviors, the crystal plasticity finite element methods become essential tools for uncovering the underlying mechanisms of crystalline materials. Since crystal plasticity constitutive models involve numerous complex parameters, a thorough analysis of these parameters is critical for a deeper understanding of the micromechanical behaviors of alloys. The crystal plasticity model used in this study incorporates the Peierls stress, which accounts for the

* 收稿日期: 2024-09-29; 修订日期: 2025-02-19

基金项目: 国家自然科学基金(12072369;12072368);湖南省杰出青年基金(2022JJ10058)

作者简介: 马培源(1997—),男,博士生(E-mail: mapeiyuan@nudt.edu.cn);

陈荣(1981—),男,教授,博士,博士生导师(通讯作者. E-mail: r_chen@nudt.edu.cn).

引用格式: 马培源, 林玉亮, 陈荣. 铸态 TiZrNbV 晶体塑性本构模型的参数分析与参数反演[J]. 应用数学和力学, 2025, 46(5): 563-581.

short-range potential barriers of the material, thereby enabling a more accurate simulation of its strain-rate behavior. Through experimental design and range analysis, the key constitutive parameters affecting the alloy's mechanical properties were identified. Univariate analysis was then employed to clarify the specific effects of these critical parameters on the mechanical characteristics of the material. For parameter inversion, an optimization-based approach was developed, combining the support vector regression with optimization algorithms. This method effectively inverts crystal plasticity constitutive parameters from macroscopic mechanical testing data. For the cast TiZrNbV alloy, a set of optimal parameters was successfully inverted, and the agreement between simulation results and experimental data validated the method's effectiveness. This study provides valuable insights for predicting the mechanical behaviors, guiding material design, and optimizing the performances of refractory high-entropy alloys.

Key words: refractory high entropy alloy; crystal plasticity theory; parameter inversion; optimization design

0 引 言

难熔高熵合金是2010年由美国空军研究实验室的Senkov等^[1-3]首次根据高熵合金理念设计并制备出来的,他们将多种易氧化难熔元素作为高熵合金的主元金属,如W、Ta、Nb、V等难熔金属元素,主要由较为稳定的体心立方(body centered cubic, BCC)相组成。相比常规高熵合金,难熔高熵合金具备高强度、高温抗软化等优异性能^[1, 4-6],同时难熔高熵合金因其显著的释能潜力而备受关注。

高熵合金的释能能力主要受限于合金的力学特性^[7-8],而力学特性又是由合金的细观结构所决定的。晶体塑性有限元法(crystal plasticity finite element method, CPFEM)是一种用于分析微观结构演化对材料力学响应影响的有效途径。然而,由于晶体塑性本构模型参数众多且复杂,确保模拟结果与试验数据精确匹配是一项挑战。尤其在考虑其他微结构演化行为时,参数反演的难度进一步上升,这增加了准确预测合金力学行为的难度。因此,有必要探究晶体塑性本构模型参数对合金力学行为的影响规律,为初步研究高熵合金细观力学特性提供研究基础。

CPFEM是将从晶体变形、微结构演化相关的试验规律和理论研究中获得的物理信息转化为各向异性弹塑性平均场连续近似的数值模拟方法,其能够适用于从小尺寸细观力学跨越至宏观尺度的广泛情况。目前有不少学者通过引入率效应至晶体塑性理论中,并对材料动态力学行为开展相关研究。Xie等^[9]将PTW模型中应变率敏感性引入至晶体塑性理论,建立了镁合金冲击动态本构模型。Lu等^[10]提出的修正模型在剪切速率演化过程中考虑了宏观应变率,发现滑移系激活条件和Peierls应力的高应变率敏感性是导致BCC相合金钢在准静态、动态载荷下观察到不同力学性能的原因。为研究钛合金在宽应变率下加工硬化-动态回复区的流动行为,Bobbili等^[11]结合Arrhenius方程修正了晶体塑性流动模型,较好地描述了钛合金的力学行为。上述研究多数是将宏观率效应描述的模型引入至晶体塑性模型中,实现材料细观尺度上的动态行为分析,而较少考虑控制率效应的微观机制。对于本文研究的BCC相合金,其螺位错的Peierls应力即为导致材料宏观具有率效应的重要因素,本文后续的晶体塑性模型中将考虑由Peierls势垒主导的短程应力。

本构模型准确预测材料力学行为的能力,在很大程度上取决于可调材料参数的选择。因此,充分利用基于物理机制的本构模型的一个重要前提是已在良好的物理边界内识别出适当的材料参数。理论上,晶体塑性模型的大多数本构参数可以直接从单晶、单滑移相关试验中测量^[12-13]。由于大多数合金通常只能制备出多晶体试样,部分学者^[14-15]只能利用纳米压痕技术探讨特定取向下单晶的力学行为,但也很难实现由单晶力学行为向多晶力学行为的跨越。利用试验手段正向标定材料参数的方式不易实现,Herrera-Solaz等^[16]提出了一种逆向优化方法,用于从多晶力学行为的试验结果来反演单晶参数。

本构参数的反演问题^[17]实际上是解决一个逆问题,即通过适当调整本构模型参数,直至仿真结果与试验数据相匹配。对于参数数量较少的简单模型,通常可以简单地使用试错法或回归法计算校准参数。然而,这对于具有大量材料参数和它们之间的非线性相互作用的复杂本构模型是不切实际的。随着智能优化算法的发展,合适的优化方法能够较好地解决材料准静态、低应变率加载下本构模型的参数反演问题,Sedighiani

等^[18]使用响应面法和遗传算法(genetic algorithm, GA)反演出 BCC 相钢、FCC 相铜和 HCP 相镁的晶体塑性本构参数,Sun 等^[19]使用 Bayes 优化方法反演出黏塑性自洽多晶塑性模型参数,周瑞等^[20]使用机器学习和 GA 反演出非局部晶体塑性本构参数。

随着材料在高应变率条件下力学行为研究的深入,预测所需的物理信息不断增加,使得本构参数反演问题变得更加复杂,需要建立能够处理多输入和多输出关系的模型.支持向量回归(support vector regression, SVR)^[21]方法因其在处理非线性映射方面的能力而成为解决这类问题的有效工具.SVR 具备高维数据处理能力、良好的稳健性和泛化性,并且其优化求解过程能够确保找到全局最优解,避免了局部最优解的问题.此外,SVR 的稀疏性特点有助于降低计算成本并简化模型.尽管 SVR 本身存在一些需要调整的参数,可能影响模型的非线性映射准确性,但通过结合智能优化算法^[22],例如 GA 或粒子群优化,可以有效地进行参数标定,进一步提升 SVR 在本构参数反演中的预测精度和鲁棒性。

本文主要的研究目的是获取铸态 TiZrNbV 高熵合金在准静态、动态载荷下的晶体塑性本构模型参数,并提出了一套本构模型参数反演方法.本文基于晶体塑性本构模型,通过数值模拟得到了不同应变率下多晶模型的应力-应变曲线数据样本;然后利用数据样本开展参数分析,明确各参数对材料力学行为的影响,同时利用数据样本建立了从本构参数到力学响应的代理模型;最后将上述建立的代理模型与优化算法结合,进行优化求解,最终得到了晶体塑性本构参数的收敛解。

1 模型与方法

为了解决材料准静态、动态下晶体塑性本构模型参数反演这一难题,本文采用一种结合代理模型的优化设计方法来进行相关工作.图 1 为本文参数反演相关步骤的流程图,主要分为四个阶段:第一阶段:数据样本生成阶段,调整晶体塑性本构模型的参数,并通过晶体塑性有限元模拟来生成大量的数据样本;第二阶段:参数分析阶段,根据第一阶段的数据样本,通过极差分析开展参数分析,以研究各参数对力学响应的影响;第三阶段:代理模型构建阶段,利用第一阶段的数据样本,基于 SVR 方法,构建从本构参数到力学响应的代理模型;第四阶段:优化设计求解阶段,基于第三阶段建立的代理模型,运用优化算法进行优化设计计算,从而反演得到参数结果,并与第二阶段结果进行相互验证。

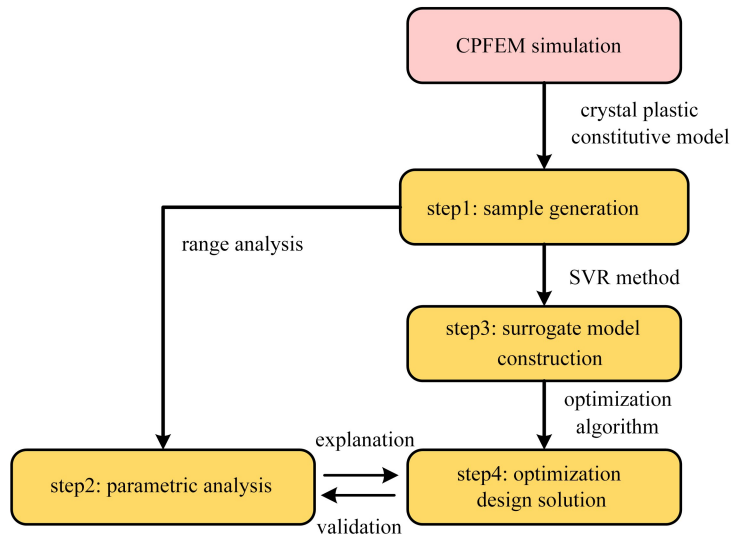


图 1 参数反演步骤流程

Fig. 1 The flowchart of parameter inversion steps

1.1 晶体塑性本构模型

为获取各晶体塑性本构参数下应力-应变曲线的数据样本,采用了晶体塑性模型描述其力学行为.与传统塑性模型类似,晶体塑性模型的主要目的^[23]是建立符合塑性变形机理的流动法则、硬化规律以及状态变量(位错密度、孪晶体积等)演化模型,但与传统塑性模型的不同之处在于晶体塑性考虑了晶粒的各向异性、

变形机制等,能更好地体现出晶体材料受载后的细观内变量演化过程,从而能够解释不同环境下合金的力学行为。

晶体发生变形时总变形梯度^[24]可由晶格畸变引起的弹性变形梯度和由位错滑移等变形机制引起的塑性变形梯度组成:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p, \quad (1)$$

其中, \mathbf{F}^e 为弹性变形梯度, \mathbf{F}^p 为塑性变形梯度, 由于铸态 TiZrNbV 合金通常呈现 BCC 相, 并且主要以位错滑移作为材料塑性变形机制^[25-26], 则 \mathbf{F}^p 表达式为

$$\dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{s}^{\alpha} \otimes \mathbf{m}^{\alpha}, \quad (2)$$

其中, $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 为滑移系 α 下的位错滑移速率, 基矢量 \mathbf{s}^{α} , \mathbf{m}^{α} 分别为滑移系 α 下的滑移方向和滑移面法向. 根据文献^[27]的试验观察结果和文献^[28]的原子模型仿真结果, 假定室温 BCC 相合金能够启动的滑移系为 $\{110\} \langle 111 \rangle$, $\{112\} \langle 111 \rangle$.

对于 BCC 相合金, 其主要通过螺位错运动来实现塑性变形, 控制螺位错的 Peierls 应力是受短程应力主导的^[10], 本文在唯象晶体塑性模型的流动法则^[29]基础上考虑短程应力^[30], 滑移系 α 下的滑移速率 $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 由该滑移系下的分解切应力和硬化应力、短程应力共同决定:

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \begin{cases} \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^{\alpha}}{g^{\alpha} + \tau_f} \right|^n \operatorname{sgn}(\tau^{\alpha}), & |\tau^{\alpha}| \geq |g^{\alpha} + \tau_f|, \\ 0, & |\tau^{\alpha}| < |g^{\alpha} + \tau_f|, \end{cases} \quad (3)$$

其中, $\dot{\gamma}_0$ 为初始位错滑移速率, τ^{α} 为滑移系 α 下的分解切应力, g^{α} 为滑移系 α 下的硬化应力, τ_f 为螺位错主导的短程应力, $g^{\alpha} + \tau_f$ 为滑移系 α 下的当前强度, n 为率敏感系数, sgn 函数为符号函数, 确保剪切滑移方向 $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 与分解切应力方向 τ^{α} 一致。

短程势垒对应变率非常敏感, 故短程应力控制着材料应变率效应^[31]. 短程应力 τ_f 是由螺位错扭结对所需势垒所控制^[30]:

$$\tau_f = \tau_{p0} \left(1 - \frac{k_B T \ln(\dot{\gamma}_{p0}/\dot{\varepsilon})}{2H_k} \right)^2, \quad (4)$$

其中, τ_{p0} 为螺位错的 Peierls 应力, k_B 为 Boltzmann 常数, $\dot{\gamma}_{p0}$ 为参考应变率, $2H_k$ 为螺位错上扭结对所形成的焓值, $\dot{\varepsilon}$ 为模型所施加的应变率. 由唯象晶体塑性模型的硬化规律, 可求出滑移系 α 下的硬化应力:

$$\dot{g}^{\alpha} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{\beta}, \quad (5)$$

其中 $h_{\alpha\beta}$ 为滑移硬化模量, 当 $\alpha \neq \beta$ 时, $h_{\alpha\beta}$ 为潜硬化系数, 当 $\alpha = \beta$ 时, $h_{\alpha\beta} = h_{\alpha\alpha}$ 即为自硬化. 硬化模型采用 Peirce-Asaro-Needleman 硬化模型^[32], 其具体表达式如下:

$$h_{\alpha\beta} = \begin{cases} h_{\alpha\alpha}(\gamma) = h_0 \operatorname{sech}^2 \left(\left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \right), & \alpha = \beta, \\ q h_{\alpha\alpha}(\gamma), & \alpha \neq \beta, \end{cases} \quad (6)$$

其中, h_0 为初始硬化模量, τ_s 为饱和屈服应力, τ_0 为初始临界剪切应力, q 为硬化系数, γ 为晶体各滑移系滑移应变之和。

1.2 极差分析方法

极差分析是参数影响分析中的常用方法之一, 本文假设设计的是 m 因素 n 水平的试验, K_{jk} 是第 j 各因素 k 水平所对应的所有目标响应之和, $\overline{K_{jk}}$ 为 K_{jk} 的平均值. R_j 为第 j 个因素的极差, 即第 j 个因素在各水平下平均响应值的极大与极小之差, 如下所示:

$$R_j = \max(\overline{K_{j1}}, \overline{K_{j2}}, \dots, \overline{K_{jn}}) - \min(\overline{K_{j1}}, \overline{K_{j2}}, \dots, \overline{K_{jn}}), \quad (7)$$

其中 R_j 反映了第 j 个因素在水平波动时对应目标响应的变化幅值. 此外, 还可通过归一化处理得到对应目标响应的第 j 个因素影响程度的大小 P_{R_j} , 如下所示:

$$P_{R_j} = \frac{R_j}{\sum_{i=1}^m R_i} \times 100\% . \quad (8)$$

因此,根据影响程度 P_{R_j} 的大小就可以判断模型变量参数敏感性的主次。

1.3 MLS-SVR 方法

尽管传统的 SVR 方法在处理单输出样本学习方面取得了显著进展,但在处理多输出问题时仍然面临挑战。鉴于本文所构建的代理模型涉及多输出回归问题,本文引入多输出最小二乘支持向量回归(multi-output least-squares support vector regression, MLS-SVR)方法^[21]。MLS-SVR 是一种专门针对多输出回归任务设计的算法,能够有效地处理和预测多维度的输出结果。这种方法不仅提高多输出预测的准确性,也为复杂系统的建模和分析提供新的工具。MLS-SVR 的优势在于其能够从多变量输入特征空间学习到多变量输出空间的映射,从而实现对多个输出特征的精确预测^[33]。

MLS-SVR 方法通过引入非线性映射函数 $\varphi(\cdot)$,将多输入 $\mathbf{x}(\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d)$ 和多输出 $\mathbf{Y}(\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^m)$ 之间的非线性关系转化为高维特征空间中的线性关系拟合问题。需要在高维特征空间建立拟合函数,即回归函数 $f(\mathbf{x})$,表达式为

$$f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varphi}^T(\mathbf{x}) \mathbf{W} + \mathbf{b}^T, \quad (9)$$

式中, $\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x})$ 为输入数据 \mathbf{x} 在高维特征空间的非线性映射函数, \mathbf{W} 和 \mathbf{b} 均为映射参数。

为了使回归函数最逼近输出数据,回归函数在拟合时会存在一个微小的差量,即不敏感函数 ξ 。因此,便可通过对不敏感函数 ξ 进行优化来求解回归函数中的映射参数 \mathbf{W} 和 \mathbf{b} , 其目标函数为

$$\begin{cases} \min_{\mathbf{w}_0 \in \mathbb{R}^{n_h}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n_h}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m} \mathcal{J}(\mathbf{w}_0, \mathbf{V}, \boldsymbol{\Xi}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{W}\|^2 + L_C = \\ \frac{1}{2} \mathbf{w}_0^T \mathbf{w}_0 + \frac{1}{2} \frac{\lambda}{m} \text{trace}(\mathbf{V}^T \mathbf{V}) + \gamma \frac{1}{2} \text{trace}(\boldsymbol{\Xi}^T \boldsymbol{\Xi}), \\ \text{s.t. } \mathbf{Y} = \mathbf{Z}^T \mathbf{W} + \text{repmat}(\mathbf{b}^T, l, 1) + \boldsymbol{\Xi}, \end{cases} \quad (10)$$

其中, $\boldsymbol{\Xi} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m) \in \mathbb{R}^{l \times m}$; $\mathbf{W} = (\mathbf{w}_0 + \mathbf{v}_1, \mathbf{w}_0 + \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{w}_0 + \mathbf{v}_m) \in \mathbb{R}^{n_h \times m}$; $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m) \in \mathbb{R}^{n_h \times m}$; $\mathbf{Z} = (\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_1), \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_2), \dots, \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}_l)) \in \mathbb{R}^{n_h \times l}$; $\mathbf{Y} = (y_1, y_2, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^{l \times m}$; $L_C = \gamma \frac{1}{2} \text{trace}(\boldsymbol{\Xi}^T \boldsymbol{\Xi})$ 为损失函数,用于描述不敏感函数 ξ 对目标函数的影响; λ, γ 分别为目标函数的控制参数。

根据目标函数和约束条件,引入 Lagrange 函数:

$$\mathcal{L}(\mathbf{w}_0, \mathbf{V}, \mathbf{b}, \boldsymbol{\Xi}, \mathbf{A}) = \mathcal{J}(\mathbf{w}_0, \mathbf{V}, \boldsymbol{\Xi}) - \text{trace}(\mathbf{A}^T (\mathbf{Z}^T \mathbf{W} + \text{repmat}(\mathbf{b}^T, l, 1) + \boldsymbol{\Xi} - \mathbf{Y})), \quad (11)$$

其中 $\mathbf{A} = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) \in \mathbb{R}^{l \times m}$ 是由 Lagrange 乘数组成的矩阵,由 KKT(Karush-Kuhn-Tucker)条件能消除 $\mathbf{W}, \boldsymbol{\Xi}$, 并解出 \mathbf{A} 和 \mathbf{b} , 最终将其代入式(9)得到针对多输出预测问题的回归函数为

$$f(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\varphi}^T(\mathbf{x}) \mathbf{W} + \mathbf{b}^T = \text{repmat} \left(\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^l \alpha_{i,j}^* \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j), 1, m \right) + \frac{m}{\lambda} \sum_{j=1}^l \alpha_j^* \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) + \mathbf{b}^T, \quad (12)$$

其中 $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$ 为核函数,本文将核函数取为径向基函数型,其表达式如下:

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{z}) = \boldsymbol{\varphi}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{z}) = \exp(-p \|\mathbf{x} - \mathbf{z}\|^2), \quad p > 0, \quad (13)$$

其中 p 为核参数。

MLS-SVR 模型就是通过映射函数将非线性问题转化为高维特征空间拟合问题,利用定义的损失函数在高维空间求得拟合最优解。

1.4 优化算法

本文利用上述代理模型开展优化分析时,先用 GA^[34]开展全局优化分析,再用序列二次规划(sequential quadratic programming, SQP)^[35]开展局部优化分析。

GA^[34]是基于自然选择和遗传学原理的搜索算法。它们通过模拟 Darwin 进化论中的选择、交叉(杂交)、变异等过程来解决优化问题。以下是 GA 优化的基本流程:

① 编码:首先,GA 需要将问题的解编码为染色体(通常是一串数字序列),这些染色体构成了初始种群。

② 适应度函数:定义一个适应度函数来评估每个染色体的性能,即它们是如何解决特定问题的。

③ 选择:更高适应度的染色体更有可能被选择用于产生后代,选择过程模拟了自然界中“适者生存”的原则。

④ 交叉:选中的染色体配对并交换它们的部分,以产生新的染色体,这一过程模拟生物杂交,有助于探索解空间。

⑤ 变异:以较小的概率随机改变某些染色体的部分,以引入新的遗传变异,从而避免局部最优。

⑥ 新一代种群:通过选择、交叉和变异操作生成的新染色体群体成为新一代种群,然后重复上述过程,直到满足终止条件(如达到最大迭代次数或解的质量满足要求)。

SQP^[35]是用于解决非线性规划问题的一种迭代方法,SQP方法通过在每次迭代中解决一个近似的二次规划问题来逐步接近全局最优解。以下是SQP优化的基本流程:

① 问题定义:考虑一个非线性规划问题,目标是 minimize 目标函数 $f(x)$, 其中 x 是决策变量,受到等式 $h(x) = 0$ 和不等式 $g(x) \leq 0$ 约束。

② Lagrange 函数:构建了 Lagrange 函数 $L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda Tg(x) + \mu Th(x)$, 其中 λ 和 μ 分别是不等式和等式约束的 Lagrange 乘子。

③ KKT 条件:在最优解处,KKT 条件必须满足,包括梯度为零和互补松弛性。

④ 二次规划子问题:在每次迭代中,构建并解决一个二次规划子问题,该子问题以当前点的线性化和二次近似为基础。

⑤ 更新和迭代:根据子问题的解更新变量 x , 然后重复上述过程,直到满足收敛标准。

2 优化设计驱动的参数反演策略

2.1 参数反演思路

在第一节中主要介绍了参数反演各阶段所需的模型与方法,因此还需要明确每个阶段的具体研究思路。图2为参数反演优化设计流程图,与图1相似,同样分为四个阶段:第一阶段,针对晶体塑性本构参数进行试验设计,利用 CPFEM 求解获取数据样本;第二阶段,对数据样本进行参数敏感性分析,明确各本构参数对屈服强度、极限强度的影响占比,再对各本构参数进行单因素影响分析,明确各本构参数对材料应力-应变曲线的影响行为;第三阶段,将用于参数敏感性分析的数据样本作为代理模型的输入,然后利用 MLS-SVR 方法建立输入为晶体塑性本构参数,输出为误差响应的多输出代理模型;第四阶段,利用前阶段构建的代理模型首先开展 GA 全局优化分析,其次将 GA 求解的结果作为 SQP 算法的初值再开展局部优化分析,然后获得经两种优化策略求解的最优解,将其输入至代理模型并更新优化指标,最后当优化指标达到收敛条件则停止优化求解,反之则继续进行优化求解。

2.2 数据样本生成

晶体塑性本构模型的参数分析和参数反演需要一定的数据样本,本小节主要是为后续开展参数影响分析和代理模型构建提供应力-应变曲线的数据样本。这些数据样本包括通过有限元模拟获得的仿真数据,以及来自文献的试验数据,后者将用于模型的校准过程。

为获取应力-应变曲线的数据样本,基于前文介绍的晶体塑性本构模型,将其应用于细观尺度上的多晶有限元模型中,从而完成铸态 TiZrNbV 合金拉伸、压缩过程中晶体塑性行为的模拟。

为模拟多晶材料在加载过程中的晶体塑性力学行为,需要建立多晶代表性体积单元(representative volume element, RVE)进行仿真,本文利用基于 Voronoi 算法的 Neper^[36-37] 软件建立了晶粒数量为 50^[38-39] 的三维多晶 RVE 模型,如图 3(a)所示,由于材料晶体取向中无明显织构^[25-26] 出现,则赋予 RVE 模型各晶粒任意晶体取向,RVE 模型的边界条件设置为:在平面 ADHE 中约束沿 x 方向的位移,在平面 AEFB 中约束沿 y 方向的位移,在平面 EHGf 中约束沿 z 方向的位移,在平面 CBFg 中通过点面耦合的方法施加沿 z 方向的应变载荷,如图 3(b)所示。

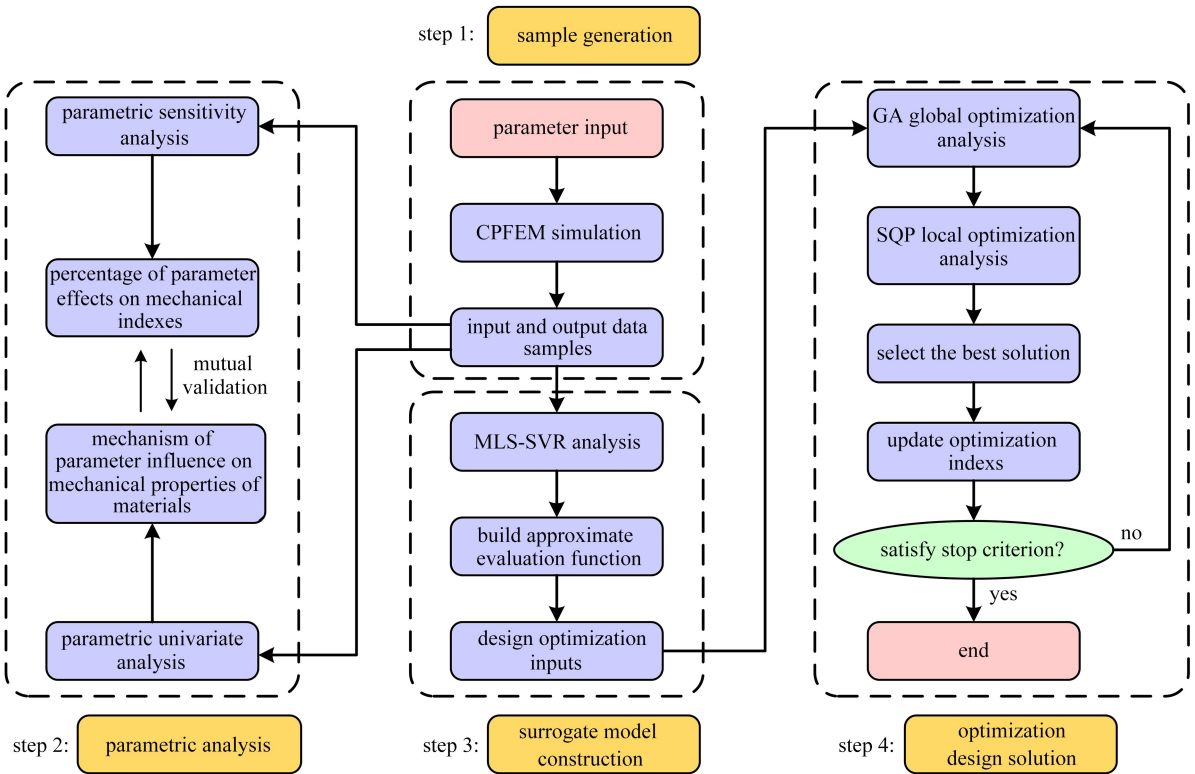


图 2 参数反演优化设计流程

Fig. 2 The flow chart of the parameter inversion optimization design method

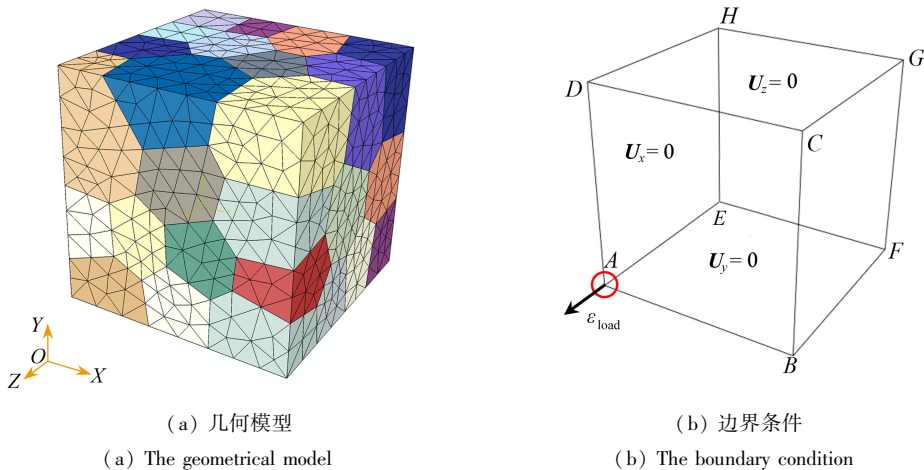


图 3 RVE 模型的示意图

Fig. 3 Schematic diagram of the RVE model

当利用晶体塑性本构模型描述铸态 TiZrNbV 的晶体力学行为时,还需要确定相关材料参数.对于晶体弹性参数,利用基于密度泛函理论的第一性原理可得到 TiZrNbV 的晶体弹性参数^[40],即 $C_{11} = 159.8 \text{ GPa}$, $C_{12} = 114.3 \text{ GPa}$, $C_{44} = 18.5 \text{ GPa}$.对于晶体塑性模型的参数,即为文中需要反演的主要参数,将通过正交试验设计的方法建立参数输入集,如表 1 所示.主要参考了常温下 BCC 相铁^[41]、钛^[31,42]和 Cantor 高熵合金^[38]的相关材料本构参数,假定各滑移系下的硬化系数 q 均取 1.

图 4 为 TiZrNbV 准静态拉伸、压缩和动态压缩的试验曲线结果,其中准静态拉伸试验曲线部分是 Wang 等^[26]将 TiZrNbV 狗骨形试样进行了准静态(应变率为 10^{-3} s^{-1})单轴拉伸试验得到的应力-应变曲线;准静态压缩、动态压缩试验曲线部分是 Ren 等^[25]将 TiZrNbV 圆片试样分别利用万能试验机、Hopkinson 压杆测得的应力-应变曲线.本文主要目的是根据试验结果反演出仿真与试验结果相近的晶体塑性本构模型参数,所以

此小节的试验样本作为数据校准,便于后续参数标定工作建立误差响应指标。

表1 试验设计各因素的取值范围

Table 1 The range of values for each factor in the experimental design

design variable	symbol	lower limit	upper limit
initial hardening modulus	h_0 /MPa	100	500
saturation stress	τ_s /MPa	220	780
initial critical resolved shear stress	τ_0 /MPa	200	700
rate sensitivity exponent	n_0	30	80
reference slip shear rate	$\dot{\gamma}_0$ /s ⁻¹	2×10^{-3}	5×10^{-3}
Peierls stress	τ_{p0} /MPa	300	900
reference strain rate	$\dot{\gamma}_{p0}$ /s ⁻¹	5.7×10^7	1.51×10^8
kink-pair formation enthalpy	H_k /eV	0.38	0.56

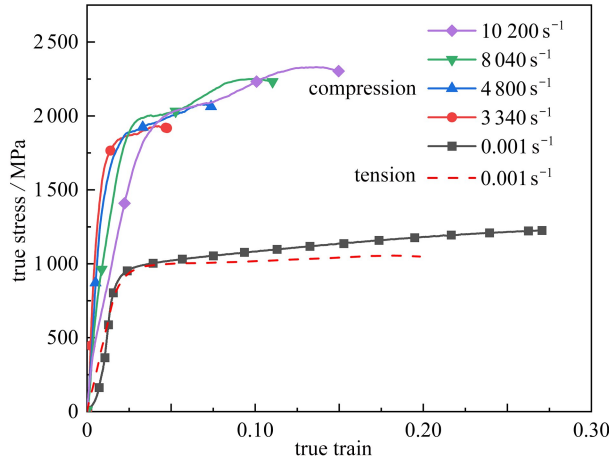


图4 不同应变率下的应力-应变试验结果^[25-26]

Fig. 4 Experimental stress-strain results at different strain rates^[25-26]

2.3 参数影响分析

为明确各参数的内在影响机制,将对数据样本进行参数敏感性分析以明确各本构参数对误差响应指标的影响占比,再对各本构参数进行单因素影响分析以明确各本构参数对材料应力-应变曲线的影响行为。

由于本文后续构建的代理模型存在较高非线性,在考虑响应面一阶曲率的前提下,至少需要三级全因子设计,即需要 3^k 次试验,庞大的计算量使得三级因子设计很少使用.大部分学者^[18] 通常使用中心复合设计 (central composite design, CCD),该方法扩展了设计空间并得到高阶信息,能够给响应近似模型提供样本数据,具有设计简单、试验次数少、预测性好等优点,其主要用于响应面分析和优化过程.CCD 试验由二级全因子设计、星点设计与中心点重复试验组成,本研究的试验数量共为 $2^k + 2k + c_p$, k 为因子数量, c_p 为中心点数量,值取 1.

为描述各本构参数对材料力学特性 (屈服强度、极限强度) 的影响情况,将定义各加载条件下仿真与试验的力学特性差异为误差响应特征,其屈服强度误差响应特征 D_1 为

$$D_1^k(\mathbf{x}, \dot{\epsilon}) = \frac{\sqrt{[\hat{\sigma}_0(\mathbf{x}, \dot{\epsilon}) - \sigma_0(\dot{\epsilon})]^2}}{\sigma_0(\dot{\epsilon})}, \quad (14)$$

其中, $\sigma(\dot{\epsilon})$ 为在加载应变率为 $\dot{\epsilon}$ 时某一应变下试验测定的应力,下标索引 0 代表试验结果中的屈服应变,即 $\sigma_0(\dot{\epsilon})$ 为试验测定的屈服应力; $\hat{\sigma}(\mathbf{x}, \dot{\epsilon})$ 为某组本构参数 \mathbf{x} 下仿真得到的预测应力, k 为某种加载条件 (其由加载应变率 $\dot{\epsilon}$ 所决定),即 $\hat{\sigma}_0(\mathbf{x}, \dot{\epsilon})$ 为仿真得到的屈服强度。

极限强度误差响应特征 D_2 为

$$D_2^k(\mathbf{x}, \dot{\epsilon}) = \frac{\sqrt{[\hat{\sigma}_N(\mathbf{x}, \dot{\epsilon}) - \sigma_N(\dot{\epsilon})]^2}}{\sigma_N(\dot{\epsilon})}, \quad (15)$$

其中下标索引 N 代表试验结果中的最大应变,由图 4 发现不同加载条件 k 下试验数据中的最大应变不一样,此处假定高应变率 ($\dot{\varepsilon} \geq 10^3 \text{ s}^{-1}$) 加载下最大应变取各自试验数据中的最大应变,低应变率 ($\dot{\varepsilon} = 10^{-3} \text{ s}^{-1}$) 加载下最大应变统一取 0.175,即 $\sigma_N(\dot{\varepsilon})$ 为试验测定的极限强度, $\hat{\sigma}_N(\mathbf{x}, \dot{\varepsilon})$ 为仿真得到的极限强度。

上述误差响应特征都估计了一种加载条件 k 下仿真应力-应变结果和试验数据之间的距离.对于每种类型的指标函数在所有考虑到的 K 种加载工况下,其总误差指标如下:

$$f_j = \sum_{k=1}^K D_j^k, \quad j = 1, 2, \quad (16)$$

其中, K 是本文考虑到的所有加载条件种类数量,即 6 种; j 为误差响应特征类型。

本文需要反演的本构参数分为晶体塑性模型参数,总共 8 个变量因子,通过上述试验设计方法,求解出应力-应变曲线数据样本.依据误差响应(如式(14)、(15))和极差分析,来完成变量的参数敏感性分析,并将试验设计的数据样本结果作为构建晶体塑性本构参数代理模型的数据集。

为进一步明确各本构参数对材料力学特性(屈服强度、极限强度)的影响行为,将部分参数敏感性程度较高的本构参数对材料应力-应变曲线的影响情况进行单因素分析,利用控制变量法,逐个讨论各参数对材料力学特性的影响情况。

2.4 代理模型和优化设计模型

基于试验设计获得的数据样本,本文需要构建一个代理模型,该模型以 8 个晶体塑性本构参数 \mathbf{x} 为输入,12 个误差响应特征 D 为输出.这样的模型将为后续的优化设计求解提供关键的预测响应。

本文采用 MLS-SVR 方法,这是一种适用于多输出回归的最小二乘支持向量回归方法^[21]. MLS-SVR 的优势在于,其能够从多变量输入特征空间学习到多变量输出空间的映射,从而实现了对多个响应特征的精确预测^[33]。

由 MLS-SVR 模型可知,MLS-SVR 模型的主要控制参数为 (γ, λ, p) ^[21],本文采用麻雀优化智能算法^[43]对 MLS-SVR 的控制参数 (γ, λ, p) 进行优化,进一步提高 MLS-SVR 模型的自适应能力,从而满足本文代理模型稳定性和精度的要求。

为完成本文所需要开展的参数反演并获取铸态 TiZrNbV 的晶体塑性本构参数,即参数反演思路中的第三部分,还需要构建一个优化设计模型,优化目标为误差响应特征的函数,设计变量为晶体塑性本构模型参数,约束条件为各参数在本构模型表达式中的制约关系。

整个参数反演的优化设计模型可表示为

$$\begin{cases} \min D_{\text{obj}} = \max \{ \max \{ D_1^k(x_i), D_2^k(x_i) \} \mid_{k=1,2,\dots,K} \}, & x_i \in \mathbb{R} (i = 1, 2, \dots, n), \\ \text{s.t. } g(X) \leq 0, \\ x \leq x_i \leq \bar{x} (i = 1, 2, \dots, n), \end{cases} \quad (17)$$

其中, D_{obj} 为优化目标函数, D_1, D_2 来源于误差响应特征,使优化目标函数最小的目的就是让晶体塑性本构模型的仿真结果与试验结果更加贴切,从而确定出能够反映合金细观尺度力学行为的晶体本构参数; $g(X)$ 为约束条件函数,主要确保本构理论公式中的式(6)均具有物理意义,即分母不为零,以及式(4)短程应力在加载应变率大于 10^{-3} s^{-1} 区间内都处于单调递增; n 为设计变量数目, x_i 为设计变量,即晶体塑性本构模型的待反演参数,主要根据晶体塑性本构模型的类型来确定, x, \bar{x} 分别为设计变量的取值上下限。

对于上述误差响应特征的求解,需要利用前面建立的代理模型,直接计算优化设计模型中的优化目标值.由于需要反演的参数较多,可能存在优化解的收敛性问题,本文采用 GA 全局优化和 SQP 局部优化的策略,即先用 GA 对优化设计模型进行全局优化求解,再在求解邻域内进行 SQP 的局部硬化求解,并且还将开展 50 次优化策略的求解,确保反演参数的唯一性。

3 结果与讨论

为明确晶体塑性本构模型参数对材料力学特性的影响行为以及获取铸态 TiZrNbV 合金的晶体塑性本构参数,还需要对参数敏感性分析、参数单因素分析和参数反演的结果进行讨论。

3.1 参数敏感性分析

假定各滑移系下的硬化系数 q 不变,则对其余 8 个设计变量开展中心复合试验设计,各变量取值范围如表 1 所示,进行样本试验后可得到各变量对指标的影响程度,从而确定各本构参数对误差响应指标(屈服强度、极限强度误差)的影响占比。

通过试验设计和极差分析得到各设计变量对各指标的影响权重,如图 5 所示,图中正影响即为指标结果与设计变量呈正相关行为,负影响则反之。由图 5 可知,对误差指标 f_1 和 f_2 影响程度较大的设计变量分别为率敏感系数 n_0 、初始临界切应力 τ_0 、Peierls 应力 τ_{p0} 、扭转对焓值 H_k , 主要由于上述两个指标分别表征多晶 RVE 模型的应力演变行为、应变硬化行为, n_0 通过晶体塑性流动方程控制多晶材料的流变行为, τ_0 通过硬化模型影响多晶材料的屈服强度和硬化模量, τ_{p0}, H_k 通过短程势垒控制多晶材料的极限强度。

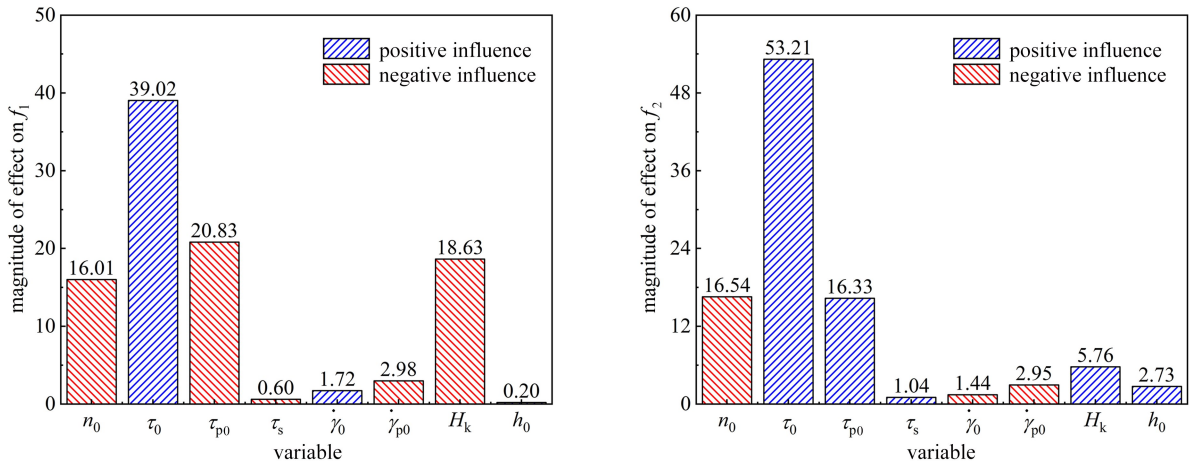
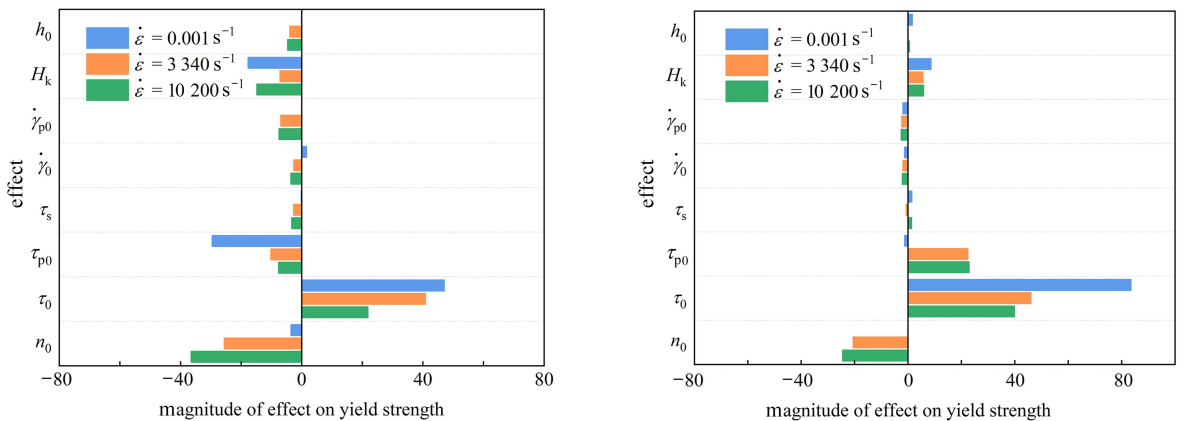


图 5 各设计变量对误差响应指标的影响权重

Fig. 5 The influence weight of each design variable on the error response indexes

为明确各设计变量对多晶 RVE 模型力学行为的影响,将探讨不同加载条件下各设计变量对多晶 RVE 模型力学指标的影响。图 6 为准静态、动态加载条件下各设计变量对多晶 RVE 模型的屈服强度、极限强度的影响程度占比。其中 ε_0 为各加载条件下试验结果中的屈服应变, ε_N 为各加载条件下试验结果中的最大应变。



(a) 各设计变量对屈服强度 ($\varepsilon = \varepsilon_0$) 的影响程度

(b) 各设计变量对极限强度 ($\varepsilon = \varepsilon_N$) 的影响程度

(a) The magnitude of effect upon the yield strength ($\varepsilon = \varepsilon_0$) of each design variable

(b) The magnitude of effect upon the ultimate strength ($\varepsilon = \varepsilon_N$) of each design variable

图 6 不同加载率下,各设计变量对各力学指标的影响程度

Fig. 6 The magnitudes of effects of each design variable on each mechanical index at different loading rates

由图 6 可知, n_0 对多晶 RVE 模型的准静态力学行为影响较小,这一结论在 Sedighiani 等^[18]的研究中有相同之处,故影响多晶 RVE 模型准静态力学行为的设计变量主要是 τ_0, τ_{p0}, H_k , 因为准静态行为中多晶

RVE 模型所承受的应变率较低, n_0 通过流动方程影响多晶材料强度的率效应不明显. 对于多晶 RVE 模型的动态力学行为, n_0, τ_0 成为主要影响其力学响应行为的重要指标, 同时还降低了 τ_{p0}, H_k 对动态行为中力学指标的影响程度. 对比不同加载条件下各设计变量对两个力学指标的影响程度, 发现影响程度的变化规律较为相似, 这也意味着控制多晶 RVE 模型力学行为的设计变量即为 $n_0, \tau_0, \tau_{p0}, H_k$.

3.2 参数单因素分析

为明确部分影响程度较大的参数对 TiZrNbV 合金力学性质的影响, 将开展 n_0, τ_0, τ_{p0} 和 H_k 对晶体力学响应行为的单因素影响分析, 参数取值如表 2 所示, 其中 level 1 为各参数初始值, level 2、level 3、level 4、level 5 数值分别约为 level 1 的 50%、75%、125%、150%. 在讨论各参数对材料屈服强度、极限强度和应变硬化模量的影响情况过程中, 利用控制变量法, 当正讨论的某个参数取 level 2—level 5 时, 其余参数的取值均为 level 1, 其中 $\tau_s, h_0, \dot{\gamma}_0, \dot{\gamma}_{p0}$ 均保持初始值不变.

表 2 参数单因素分析的设计变量取值情况

Table 2 Design variable values for parametric univariate analysis of variance

design variable	symbol	level 1	level 2	level 3	level 4	level 5
rate sensitivity exponent	n_0	30	15	22.5	37.5	45
initial critical resolved shear stress	τ_0 / MPa	300	150	225	375	450
Peierls stress	τ_{p0} / MPa	500	250	375	625	750
kink-pair formation enthalpy	H_k / eV	0.62	0.31	0.47	0.78	0.94
saturation stress	τ_s / MPa	600	-	-	-	-
initial hardening modulus	h_0 / MPa	200	-	-	-	-
reference slip shear rate	$\dot{\gamma}_0 / \text{s}^{-1}$	3×10^{-3}	-	-	-	-
reference strain rate	$\dot{\gamma}_{p0} / \text{s}^{-1}$	1×10^8	-	-	-	-

图 7 为不同率敏感系数 n_0 下 RVE 模型准静态、动态压缩的屈服强度、极限强度和应变硬化模量分布结果, 由图可知 n_0 对多晶 RVE 模型的准静态力学响应影响较小, 屈服强度最大差值为 53 MPa、极限强度最大差值为 80 MPa、应变硬化模量最大差值为 0.1 GPa, 而 n_0 对多晶 RVE 模型的动态力学响应影响较大, 屈服强度最大差值为 1 250 MPa、极限强度最大差值为 1 900 MPa、应变硬化模量最大差值为 3.79 GPa. 同时还能发现 n_0 对多晶 RVE 模型的准静态力学行为影响为弱正相关, 而对多晶 RVE 模型的动态力学行为影响为强负相关, 即随着 n_0 的增加, 准静态加载下多晶 RVE 模型的强度缓慢上升, 动态加载下多晶 RVE 模型的强度迅速下降. 主要是由于通常选取的临界剪切应变率值 $\dot{\gamma}_0$ 与准静态下多晶的应变率相近, 即 $\dot{\gamma}^\alpha / \dot{\gamma}_0 |_{\text{quasi-static}} \leq 1$, 不论 n_0 取值情况, 由流动方程推导得到的分剪切应力 τ^α 在准静态加载下都会近似等于 $g^\alpha + \tau_f$, 然而在动态加载下 $\dot{\gamma}^\alpha / \dot{\gamma}_0 |_{\text{dynamic}} \gg 1$, 故分剪切应力 τ^α 会随着 $1/n_0$ 的增大而大幅度提升.

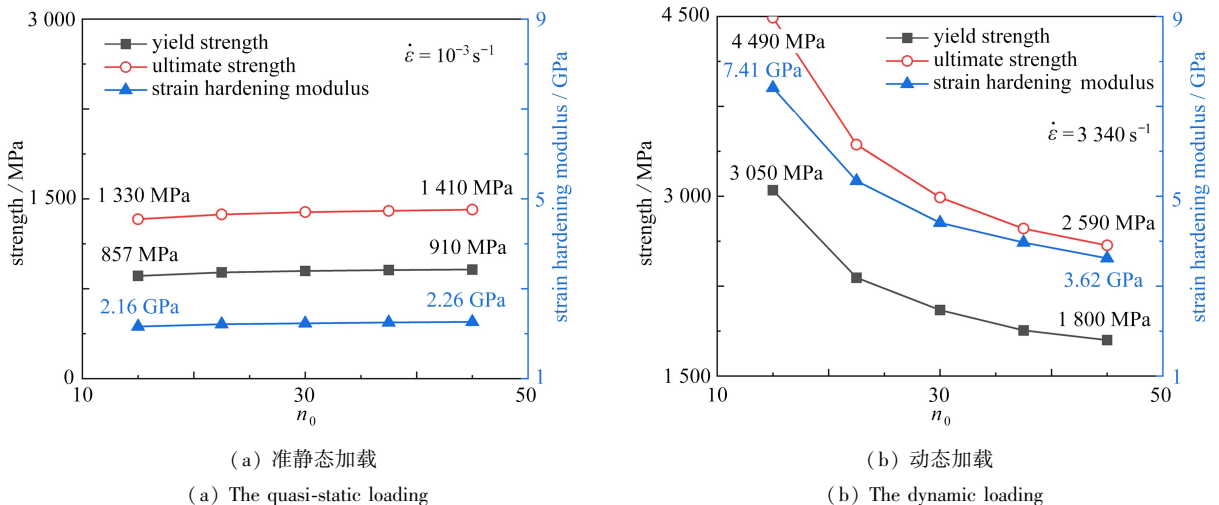


图 7 不同 n_0 下, 多晶 RVE 模型的准静态、动态力学响应结果

Fig. 7 Quasi-static and dynamic mechanical response results of the polycrystalline RVE model with different n_0 values

图8为不同初始临界剪切应力 τ_0 下RVE模型准静态、动态压缩的屈服强度、极限强度和应变硬化模量分布结果,由图可知准静态下屈服强度最大差值为607 MPa、极限强度最大差值为700 MPa、应变硬化模量最大差值为0.51 GPa,动态下屈服强度最大差值为940 MPa、极限强度最大差值为1 110 MPa、应变硬化模量最大差值为1.14 GPa,随着 τ_0 的增加,RVE模型的准静态、动态压缩下屈服强度、极限强度都明显提升,而应变硬化模量增量较小.同等 τ_0 增量下RVE模型的动态力学响应增大效果都高于准静态力学响应,主要由于分剪切应力 τ^α 仍然受 $(\dot{\gamma}^\alpha/\dot{\gamma}_0)^{n_0}$ 影响,即加载应变率越高,RVE模型的强度、硬化模量越高.

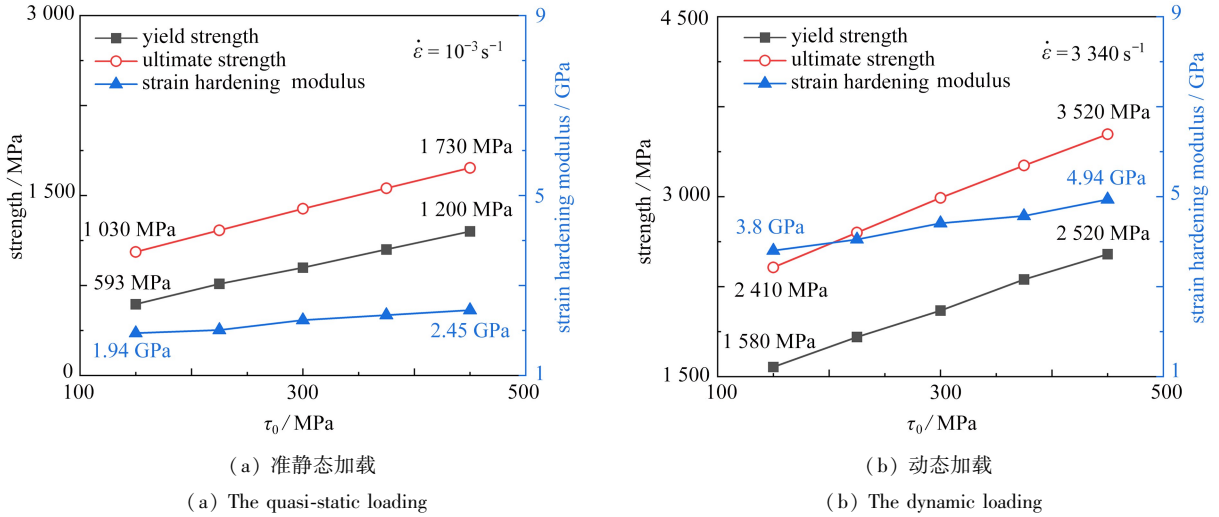


图8 不同 τ_0 下,RVE模型的准静态、动态力学响应结果

Fig. 8 Quasi-static and dynamic mechanical response results of the polycrystalline RVE model with different τ_0 values

图9为不同Peierls应力 τ_{p0} 下RVE模型准静态、动态压缩的屈服强度、极限强度和应变硬化模量分布结果,由图发现 τ_{p0} 对准静态下RVE模型压缩应力-应变曲线影响较小,准静态下屈服强度最大差值为284 MPa、极限强度最大差值为340 MPa、应变硬化模量最大差值为0.32 GPa; τ_{p0} 对动态下RVE模型压缩应力-应变曲线影响较大,动态下屈服强度最大差值为1 000 MPa、极限强度最大差值为1 260 MPa、应变硬化模量最大差值为1.58 GPa.在动态压缩下随着 τ_{p0} 的增加,RVE模型的强度、应变硬化模量都有所上升. τ_{p0} 主要通过短程应力 τ_f 来影响材料强度,在低应变率下由短程势垒 $k_B T \ln(\dot{\gamma}_{p0}/\dot{\epsilon})$ 控制的率效应并不明显,所以不同 τ_{p0} 下RVE模型的准静态力学行为几乎没太大变化,在高应变率下率效应逐渐显著,随着 τ_{p0} 的增加,RVE模型的屈服强度逐渐上升,由于应变硬化模量存在增量,所以极限强度也持续上升.

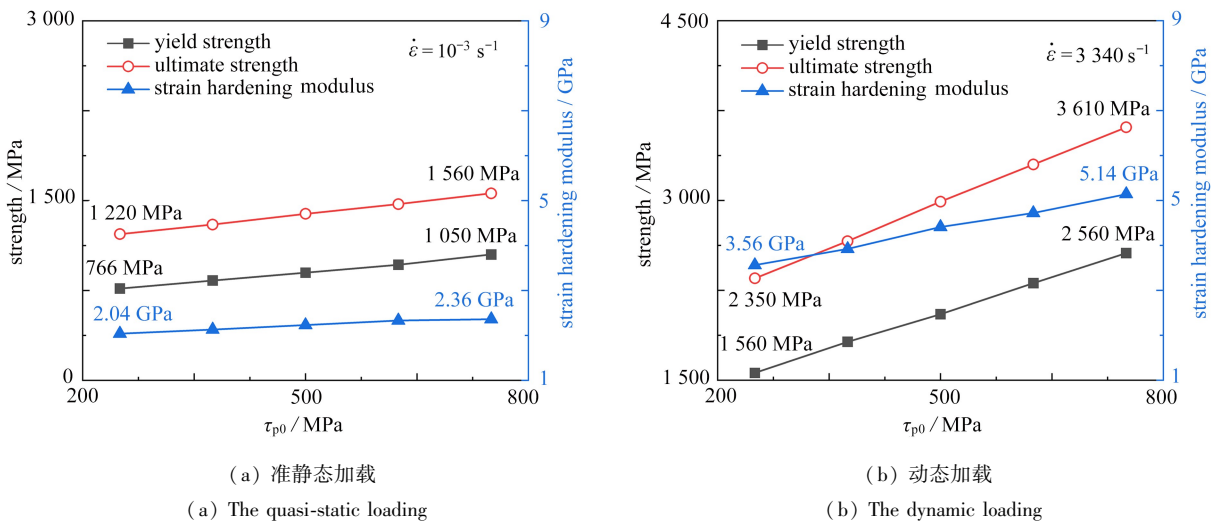


图9 不同 τ_{p0} 下,RVE模型的准静态、动态力学响应结果

Fig. 9 Quasi-static and dynamic mechanical response results of the polycrystalline RVE model with different τ_{p0} values

图 10 为不同扭结对焓值 H_k 下 RVE 模型准静态、动态压缩的屈服强度、极限强度和应变硬化模量分布结果,由图可知准静态下屈服强度最大差值为 458 MPa、极限强度最大差值为 570 MPa、应变硬化模量最大差值为 0.57 GPa,动态下屈服强度最大差值为 550 MPa、极限强度最大差值为 720 MPa、应变硬化模量最大差值为 0.94 GPa.随着 H_k 的增大,准静态、动态下材料强度、应变硬化模量都有所提升.与 τ_{p0} 相似, H_k 也是通过短程应力 τ_f 来影响材料强度,由于 H_k 通过螺位错的扭结对焓值控制短程势垒从而影响短程应力,所以在动态条件下, H_k 对 RVE 模型力学指标的影响比在准静态条件下更为显著.

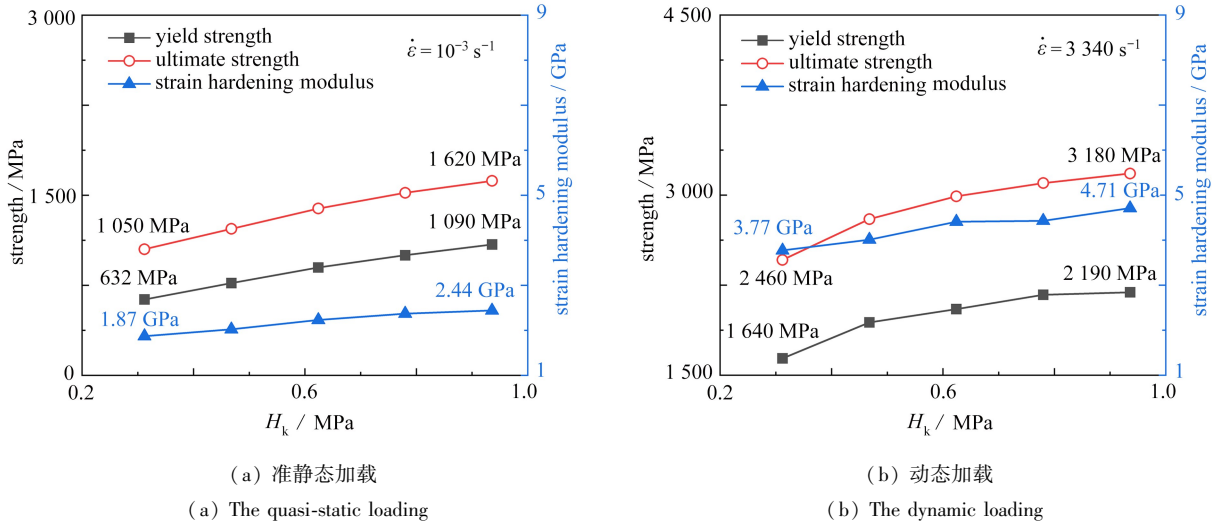


图 10 不同 H_k 下,RVE 模型的准静态、动态力学响应结果

Fig. 10 Quasi-static and dynamic mechanical response results of the polycrystalline RVE model with different H_k values

综上,将准静态、动态加载条件下各晶体塑性本构模型参数对晶体材料的屈服强度、极限强度的具体影响行为汇总至图 11.在动态加载下,主要是初始临界切应力 τ_0 、率敏感系数 n_0 、Peierls 应力 τ_{p0} 、扭结对焓值 H_k 控制着晶体材料的力学行为;在准静态加载下,主要是 τ_0, τ_{p0}, H_k 控制着晶体材料的力学行为.在材料屈服方面,晶体塑性本构模型中的 τ_0, τ_{p0}, H_k 控制着滑移系开动中的势垒, n_0 主要控制着滑移系的应变率行为,其共同决定着晶体材料的屈服强度.在材料硬化方面,主要通过流动方程中的 n_0 、硬化模型中的 τ_0 控制材料的硬化模量,从而影响材料的极限强度.

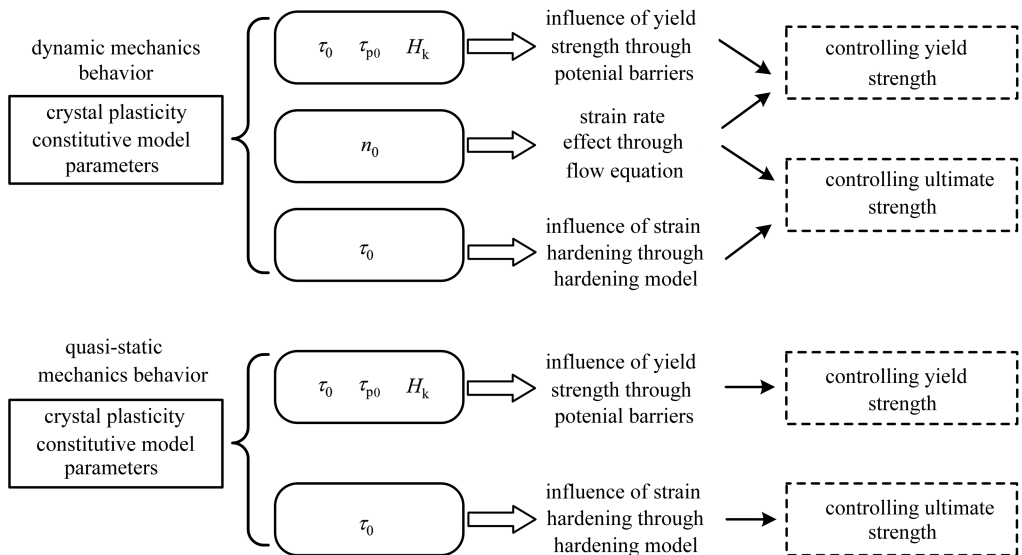


图 11 晶体塑性本构模型参数对材料力学性能的影响行为

Fig. 11 Effects of crystal plasticity constitutive model parameters on the mechanical properties of materials

3.3 参数反演结果

为反演出晶体塑性本构模型的参数,需要先基于试验设计获得的数据样本,构建一个代理模型,该模型以晶体塑性本构参数为输入,误差响应特征为输出。

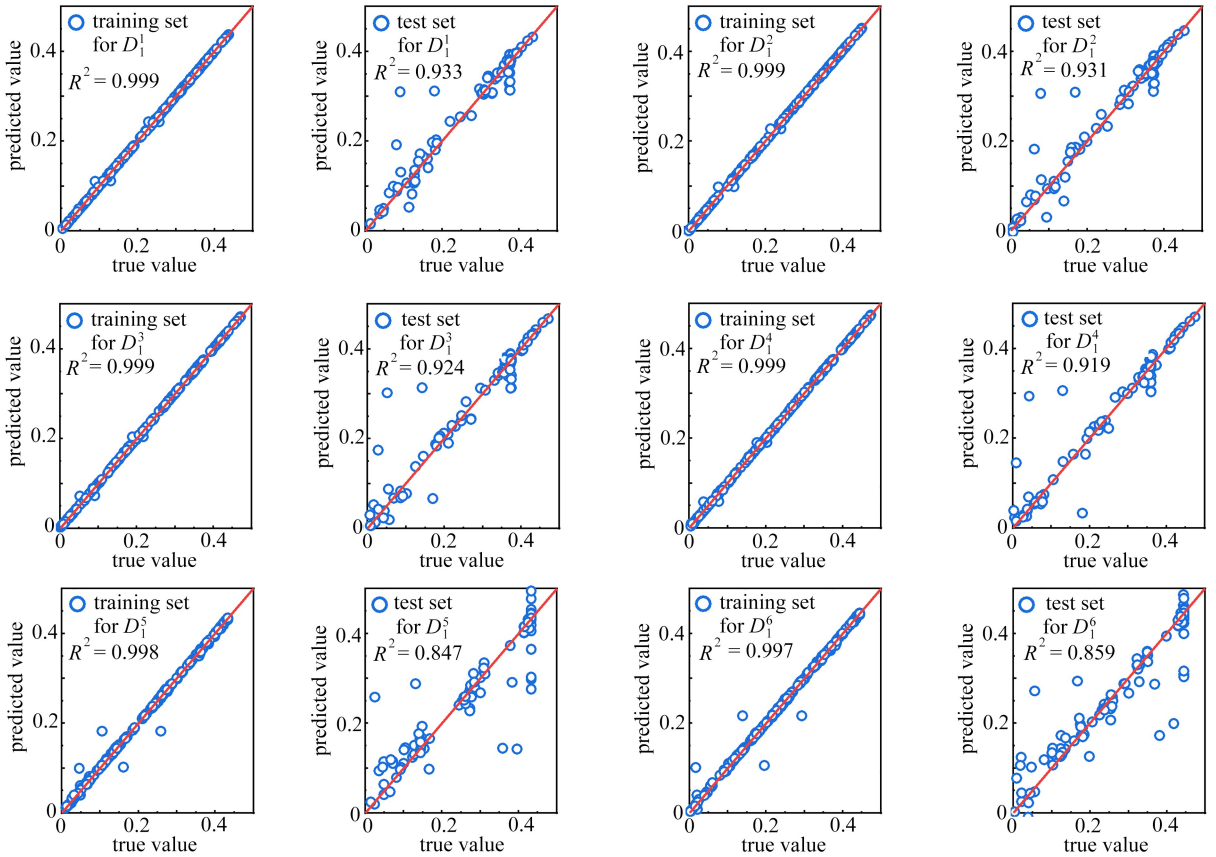
图 12 为力学指标代理模型训练集、测试集预测结果与真实值的对比情况,该代理模型是基于 MLS-SVR 方法建立的,包括 8 个输入特征(设计变量)、12 个输出指标(误差响应特征 $D_1^1 \sim D_1^6, D_2^1 \sim D_2^6$)。由图 12 可知,代理模型预测结果的 R^2 绝大部分高于 0.9,仅 D_1^5 和 D_1^6 测试集预测结果的 R^2 接近 0.85,表明该代理模型较为准确,能够为后续的参数反演优化设计提供准确的评估模型。

利用上述构建的代理模型替代晶体塑性有限元模拟,首先开展 GA 全局优化分析,其次将 GA 求解的结果作为 SQP 算法的初值再开展局部优化分析,然后获得经两种优化策略求解的最优解,将其输入至代理模型并更新优化指标,最后当优化指标达到收敛条件则停止优化求解,反之则继续进行优化求解。各设计变量取值依据表 1。

图 13 为利用代理模型完成 50 次优化求解后各设计变量的箱线图,结果表明各设计变量的解都具有一定收敛性,其中 $n_0, \tau_{00}, \tau_{p0}$ 和 H_k 的收敛性较好,基于前文分析,主要是由于这四个设计变量对两个优化指标影响最大,如图 5 所示。其余影响较小的设计变量都存在一定离散性。

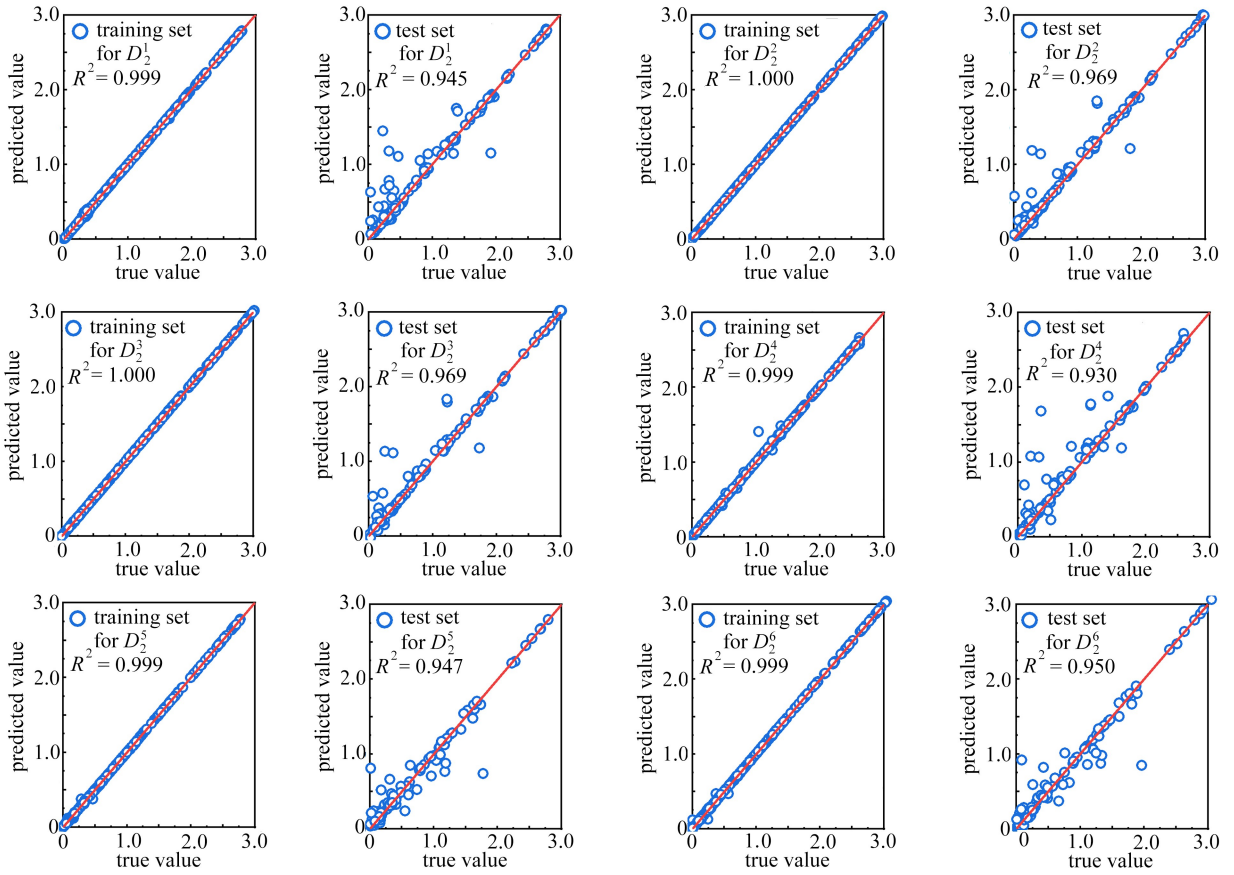
经过前面的优化模型计算后,完成反演的铸态 TiZrNbV 晶体塑性本构参数如表 3 所示。

图 14 为参数反演后 RVE 模型在各加载条件下的仿真结果与试验结果^[26]对比图,图 15 为各加载条件下参数反演得到的仿真结果与试验结果的屈服强度、极限强度对比图(图中(T)表示拉伸,(C)表示压缩)。



(a) 训练集、测试集对指标 D_1 的预测结果

(a) The prediction results of the training set and test set for index D_1



(b) 训练集、测试集对指标 D_2 的预测结果

(b) The prediction results of the training set and test set for index D_2

图 12 代理模型训练集、测试集的预测情况

Fig. 12 Prediction of the surrogate model training set and test set

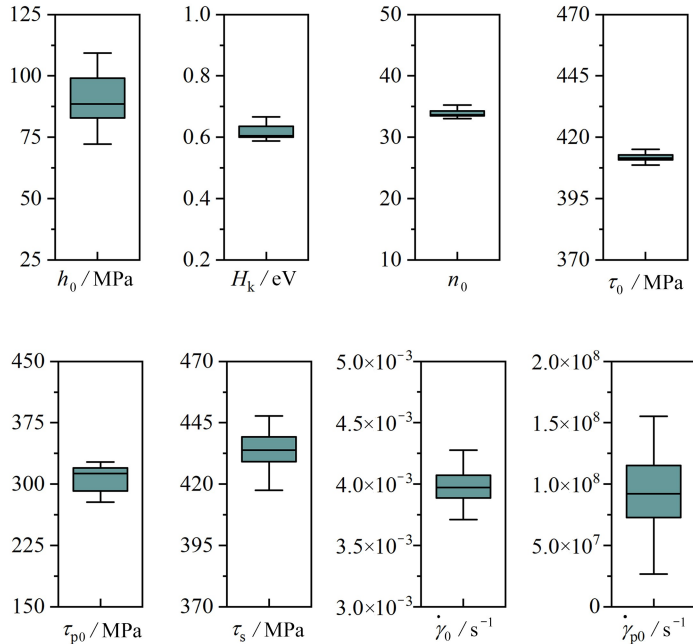


图 13 经 50 次优化求解后各材料参数优化结果的箱线图

Fig. 13 Box plots of optimization results for each material parameter after 50 optimization solutions

表3 铸态 TiZrNbV 高熵合金的晶体塑性本构模型参数

Table 3 Crystal plasticity constitutive model parameters for cast TiZrNbV high-entropy alloys

design variable	symbol	value
initial hardening modulus	h_0 /MPa	91
saturation stress	τ_s /MPa	430
initial critical resolved shear stress	τ_0 /MPa	410
rate sensitivity exponent	n_0	34
reference slip shear rate	$\dot{\gamma}_0$ /s ⁻¹	3.6×10^{-3}
Peierls stress	τ_{p0} /MPa	320
reference strain rate	$\dot{\gamma}_{p0}$ /s ⁻¹	9.2×10^7
kink-pair formation enthalpy	H_k /eV	0.60

由图 14 和图 15 可知,各加载条件下误差响应特征 D_1 不超过 3.81%, 误差响应特征 D_2 不超过 4.46%, 参数反演结果在准静态下仿真与试验吻合程度较好,但在动态下屈服强度的误差相对较小,而极限强度的误差相对较大,但是误差能控制在 5% 以内,表明这组反演好的模型参数能够描述铸态 TiZrNbV 高熵合金的力学行为。

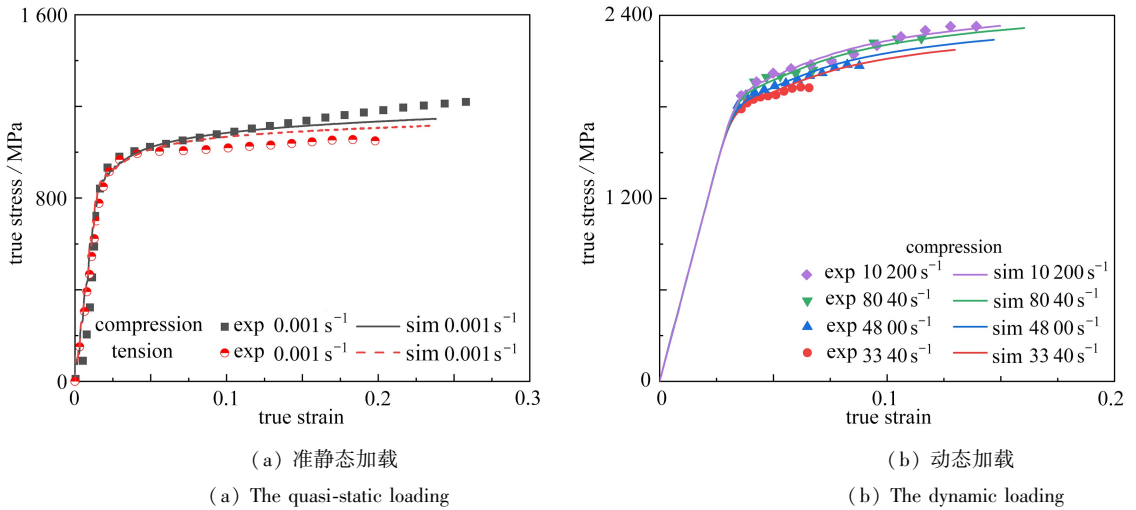


图 14 参数反演后的晶体塑性有限元模拟结果与试验结果对比

Fig. 14 Comparison of crystal plasticity model simulation results after parameter inversion with experimental results

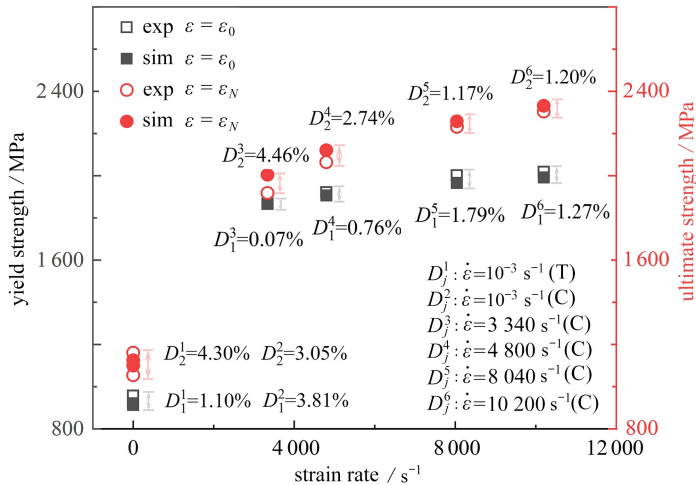


图 15 不同加载条件下仿真结果与试验结果的力学响应特性对比

Fig. 15 Comparison of mechanical response characteristics between simulation results and experimental results under different loading conditions

4 结 论

本文主要基于优化设计思想提出了一套本构模型的参数反演方法,并依据试验结果反演出铸态 TiZrNbV 高熵合金的晶体塑性本构模型参数,同时还开展了晶体塑性本构参数分析和优化设计代理模型构建的相关工作,具体结论如下:

1) 基于中心复合试验设计和极差分析法,得到了晶体塑性本构模型中各参数对优化设计指标(误差响应)的影响程度.主要控制多晶 RVE 模型力学行为的设计变量为率敏感系数 n_0 、初始临界切应力 τ_0 、Peierls 应力 τ_{p0} 、扭结对焓值 H_k ,其余变量影响较小,并且 n_0, τ_{p0} 分别主导材料的应变率行为.

2) 通过开展晶体塑性本构模型的参数单因素分析,明确了各参数对材料力学性能的影响规律.在屈服方面, τ_0, τ_{p0}, H_k 控制着滑移系开动中的势垒, n_0 控制着滑移系滑移量的应变率行为,其共同决定着晶体材料的屈服强度.在硬化方面,主要通过流动方程中的 n_0 、硬化模型中的 τ_0 控制材料的极限强度.

3) 利用本研究提出的参数反演优化设计方法,能够准确反演出晶体塑性本构模型参数.基于 MLS-SVR 模型构建的代理模型,其预测结果 R^2 绝大部分高于 0.9,表明代理模型的精度较高.利用优化设计驱动的参数反演策略,最终反演得到了铸态 TiZrNbV 本构参数的收敛值,屈服强度预测误差不超过 3.81%,极限强度预测误差不超过 4.46%,表明本参数反演方法能够较为准确预测材料的力学行为.

参考文献 (References):

- [1] SENKOV O N, SENKOVA S V, MIRACLE D B, et al. Mechanical properties of low-density, refractory multi-principal element alloys of the Cr-Nb-Ti-V-Zr system[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2013, **565**: 51-62.
- [2] MIRACLE D B, SENKOV O N. A critical review of high entropy alloys and related concepts[J]. *Acta Materialia*, 2017, **122**: 448-511.
- [3] SENKOV O N, RAO S, CHAPUT K J, et al. Compositional effect on microstructure and properties of NbTiZr-based complex concentrated alloys[J]. *Acta Materialia*, 2018, **151**: 201-215.
- [4] 唐宇, 王睿鑫, 李顺, 等. 高熵合金含能结构材料的潜力与挑战[J]. 含能材料, 2021, **29**(10): 1008-1018. (TANG Yu, WANG Ruixin, LI Shun, et al. Potential and challenges of high-entropy alloy energetic structural materials[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2021, **29**(10): 1008-1018. (in Chinese))
- [5] 梁秀兵, 万义兴, 莫金勇, 等. 新型高温高熵合金材料研究进展[J]. 科技导报, 2021, **39**(11): 96-108. (LIANG Xiubing, WAN Yixing, MO Jinyong, et al. Research progress in novel high-temperature high entropy alloys [J]. *Science & Technology Review*, 2021, **39**(11): 96-108. (in Chinese))
- [6] SENKOV O N, WOODWARD C F. Microstructure and properties of a refractory NbCrMo_{0.5}Ta_{0.5}TiZr alloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2011, **529**: 311-320.
- [7] MENG J, SHEN B, WANG J, et al. Energy-release behavior of TiZrNbV high-entropy alloy[J]. *Intermetallics*, 2023, **162**: 108036.
- [8] MENG J Y, HE J Z, ZHANG B, et al. The effect of Ti and Zr content on the structure, mechanics and energy-release characteristics of Ti-Zr-Ta alloys[J]. *Defence Technology*, 2024, **31**: 343-350.
- [9] XIE Q, ZHU Z, KANG G, et al. Crystal plasticity-based impact dynamic constitutive model of magnesium alloy[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2016, **119**: 107-113.
- [10] LU Y, ZHU Z, LI D, et al. Constitutive model of 42CrMo steel under a wide range of strain rates based on crystal plasticity theory[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2017, **679**: 215-222.
- [11] BOBBILI R, MADHU V. Constitutive modeling of dynamic flow behavior of Ti-5553 alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, **787**: 260-266.
- [12] RAABE D, SACHTLEBER M, ZHAO Z, et al. Micromechanical and macromechanical effects in grain scale polycrystal plasticity experimentation and simulation[J]. *Acta Materialia*, 2001, **49**(17): 3433-3441.
- [13] BERTIN M, DU C, HOEFNAGELS J P M, et al. Crystal plasticity parameter identification with 3D measurements and integrated digital image correlation[J]. *Acta Materialia*, 2016, **116**: 321-331.

- [14] GALLARDO-BASILE F J, ROTERS F, JENTNER R M, et al. Application of a nanoindentation-based approach for parameter identification to a crystal plasticity model for bcc metals[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2023, **881**: 145373.
- [15] CHAKRABORTY A, EISENLOHR P. Evaluation of an inverse methodology for estimating constitutive parameters in face-centered cubic materials from single crystal indentations[J]. *European Journal of Mechanics-A/Solids*, 2017, **66**: 114-124.
- [16] HERRERA-SOLAZ V, LLORCA J, DOGAN E, et al. An inverse optimization strategy to determine single crystal mechanical behavior from polycrystal tests: application to AZ31 Mg alloy[J]. *International Journal of Plasticity*, 2014, **57**: 1-15.
- [17] JI H S, SONG Q H, GUPTA M K, et al. Grain scale modelling and parameter calibration methods in crystal plasticity finite element researches: a short review[J]. *Journal of Advanced Manufacturing Science and Technology*, 2021, **1**(2): 2021005.
- [18] SEDIGHIANI K, DIEHL M, TRAKA K, et al. An efficient and robust approach to determine material parameters of crystal plasticity constitutive laws from macro-scale stress-strain curves[J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, **134**: 102779.
- [19] SUN X C, WANG H M. A method for crystal plasticity model parameter calibration based on Bayesian optimization[M]//*Magnesium Technology 2022*. Cham: Springer International Publishing, 2022: 105-111.
- [20] 周瑞, 熊宇凯, 储节磊, 等. 基于机器学习和遗传算法的非局部晶体塑性模型参数识别[J]. *力学学报*, 2024, **56**(3): 751-762. (ZHOU Rui, XIONG Yukai, CHU Jielei, et al. Parameter identification of nonlocal crystal plastic model based on machine learning and genetic algorithm[J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2024, **56**(3): 751-762. (in Chinese))
- [21] XU S, AN X, QIAO X, et al. Multi-output least-squares support vector regression machines[J]. *Pattern Recognition Letters*, 2013, **34**(9): 1078-1084.
- [22] 王兰, 董宜平, 曹进德. 基于准 ARX 模型和 SVR 算法的非线性系统切换控制[J]. *应用数学和力学*, 2022, **43**(11): 1281-1287. (WANG Lan, DONG Yiping, CAO Jinde. Switching control of nonlinear systems based on the quasi-ARX model and the SVR algorithm[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2022, **43**(11): 1281-1287. (in Chinese))
- [23] 章海明, 徐帅, 李倩, 等. 晶体塑性理论及模拟研究进展[J]. *塑性工程学报*, 2020, **27**(5): 12-32. (ZHANG Haiming, XU Shuai, LI Qian, et al. Progress of crystal plasticity theory and simulations[J]. *Journal of Plasticity Engineering*, 2020, **27**(5): 12-32. (in Chinese))
- [24] HILL R, RICE J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1972, **20**(6): 401-413.
- [25] REN K, LIU H, CHEN R, et al. Compression properties and impact energy release characteristics of TiZrNbV high-entropy alloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2021, **827**: 142074.
- [26] WANG J, BAI S, TANG Y, et al. Effect of the valence electron concentration on the yield strength of Ti-Zr-Nb-V high-entropy alloys[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, **868**: 159190.
- [27] WEINBERGER C R, BOYCE B L, BATTAILLE C C. Slip planes in BCC transition metals[J]. *International Materials Reviews*, 2013, **58**(5): 296-314.
- [28] CARROLL J D, CLARK B G, BUCHHEIT T E, et al. An experimental statistical analysis of stress projection factors in BCC tantalum[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2013, **581**: 108-118.
- [29] HUTCHINSON J W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials[J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical and Physical Sciences*, 1976, **348**(1652): 101-127.
- [30] TEREPTYEV D, XIAO X, DUBINKO A, et al. Dislocation-mediated strain hardening in tungsten: thermo-mechanical plasticity theory and experimental validation[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, **85**: 1-15.
- [31] LIM H, BATTAILLE C C, CARROLL J D, et al. A physically based model of temperature and strain rate dependent yield in BCC metals: implementation into crystal plasticity[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, **74**: 80-96.

- [32] PEIRCE D, ASARO R J, NEEDLEMAN A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals[J]. *Acta Metallurgica*, 1982, **30**(6): 1087-1119.
- [33] WU Y C, YAN Y F, LV Z M. Novel prediction model for steel mechanical properties with MSVR based on MIC and complex network clustering[J]. *Metals*, 2021, **11**(5): 747.
- [34] KATOCH S, CHAUHAN S S, KUMAR V. A review on genetic algorithm: past, present, and future[J]. *Multi-media Tools and Applications*, 2021, **80**(5): 8091-8126.
- [35] BIGGS M B. Sequential quadratic programming[M]//*Nonlinear Optimization With Engineering Applications*. Boston, MA: Springer US, 2008: 1-14.
- [36] QUEY R, RENVERSADE L. Optimal polyhedral description of 3D polycrystals: method and application to statistical and synchrotron X-ray diffraction data[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2018, **330**: 308-333.
- [37] SPETTL A, WERZ T, KRILL C E, et al. Parametric representation of 3D grain ensembles in polycrystalline microstructures[J]. *Journal of Statistical Physics*, 2014, **154**(4): 913-928.
- [38] 王姝予, 宋世杰, 陆晓翀, 等. CrMnFeCoNi 高熵合金拉伸断裂的晶体塑性有限元模拟[J]. 机械工程学报, 2021, **57**(22): 43-51. (WANG Shuyu, SONG Shijie, LU Xiaochong, et al. Tensile fracture behavior of the CrMnFeCoNi high entropy alloy: a crystal plasticity finite element simulation[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2021, **57**(22): 43-51. (in Chinese))
- [39] HU P, LIU Y, ZHU Y, et al. Crystal plasticity extended models based on thermal mechanism and damage functions: application to multiscale modeling of aluminum alloy tensile behavior[J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, **86**: 1-25.
- [40] TIAN L Y, WANG G, HARRIS J S, et al. Alloying effect on the elastic properties of refractory high-entropy alloys[J]. *Materials & Design*, 2017, **114**: 243-252.
- [41] 范婉婉, 王涛, 侯洁, 等. 基于 CPRVE 模型的 304 不锈钢极薄箔材参数标定[J]. 塑性工程学报, 2019, **26**(4): 268-273. (FAN Wanwan, WANG Tao, HOU Jie, et al. Parameters calibration of 304 stainless steel ultra-thin foil based on CPRVE model[J]. *Journal of Plasticity Engineering*, 2019, **26**(4): 268-273. (in Chinese))
- [42] 惠文. 基于 CPFEM 的 TA15 钛合金高温塑性变形研究[D]. 合肥: 合肥工业大学, 2013. (HUI Wen. Research on the plastic deformation of TA15 titanium alloy at high temperature using CPFEM[D]. Hefei: Hefei University of Technology, 2013. (in Chinese))
- [43] XUE J K, SHEN B. A novel swarm intelligence optimization approach: sparrow search algorithm[J]. *Systems Science & Control Engineering*, 2020, **8**(1): 22-34.