离散位错动力学算法及其在材料塑性行为模拟中的应用

黄敏生^{1,2*}, 黄嵩^{1,2}, 梁爽^{1,2}, 李振环^{1,2}

1. 华中科技大学力学系, 武汉 430074;

2. 华中科技大学工程结构分析与安全评定湖北省重点实验室, 武汉 430074

* 联系人, E-mail: mshuang@hust.edu.cn

2018-12-25 收稿, 2019-03-05 修回, 2019-03-05 接受, 2019-05-22 网络版发表

国家自然科学基金(11572136, 11632007)和国家优秀青年科学基金(11822204)资助

摘要 晶体材料的塑性变形由位错的运动演化而引起. 离散位错动力学(discrete dislocation dynamics, DDD)通过直接模拟大量位错的演化而研究材料的塑性变形, 因此能够揭示材料微结构-位错微结构-塑性力学行为之间内在的物理关联, 并能够自然而然地捕捉塑性变形微米/亚微米特征尺度下本征的尺度效应. 它所能模拟的尺度介于微观分子动力学模拟和宏观有限元模拟之间, 在多尺度算法中起到承上启下的作用. 本文首先系统地发展、完善和丰富了离散位错动力学-有限元(finite element method, FEM)叠加算法、DDD-FEM直接耦合算法(discrete-continuous method, DCM)以及离散位错动力学-扩展有限元(extended finite element method, XFEM)耦合算法等框架体系. 在此基础上, 利用这些方法对单晶镍基高温合金的塑性变形机理、晶体材料的断裂和损伤变形行为以及塑性行为的微尺度和微结构效应3个方面开展了系统的研究. 所得模拟结果指导了基于微结构和位错机制的单晶镍基高温合金晶体塑性本构模型的建立, 丰富和加深了人们对材料强化、循环塑性、断裂、损伤、尺度效应和微结构效应的认识. 此外, 离散位错动力学可进一步应用于诸如高温、高压、高应变率、化学腐蚀环境、高辐照等极端条件下晶体材料塑性行为的研究, 是材料力学行为多尺度模拟研究中的重要一环.

关键词 离散位错动力学, 有限元, 扩展有限元, 镍基高温合金, 微尺度效应, 微结构相关性

众所周知, 晶体材料的塑性行为主要是由大量位错的运动演化而直接引起的. 然而, 传统的基于连续介质力学框架的塑性本构关系大多都是唯象的, 并没有引入任何的位错机制, 缺乏较为坚实的物理学基础. 另外, 部分晶体塑性本构关系^[1,2]引入位错密度内变量的概念, 一定程度上考虑了位错增殖和湮灭等机制对各滑移系塑性滑移演化和强化的影响. 虽然这些影响对材料微结构和微缺陷尺度是至关重要的, 然而, 这类本构对位错的考虑是基于统计平均理论的, 数学描述上也存在一定的唯象性, 且不能考虑微结构尺度下位错运动的离散性和随机性对晶体材料塑性变形的影响.

不同于大多基于连续介质力学框架的塑性理论, 离散位错动力学(discrete dislocation dynamics, DDD)通过直接考虑大量离散位错段的动态演化从本质上来模拟材料的塑性行为, 物理基础更为坚实. 一方面, 通过一系列包含原子信息的本构法则, DDD方法能够直接捕捉位错的萌生、增殖、滑移、攀移、交滑移、交截、割阶、位错-材料微结构-相界面交互等短程作用, 因此能够有效地捕捉位错塞积、位错缠结、位错网、位错墙、位错胞、可持续位错滑移带、无位错自由通道等局部位错微结构的形成, 这是连续介质塑性理论所不能够刻画和描述的. 也正是因此, DDD能够从物

引用格式: 黄敏生, 黄嵩, 梁爽, 等. 离散位错动力学算法及其在材料塑性行为模拟中的应用. 科学通报, 2019, 64: 1864–1877

Huang M S, Huang S, Liang S, et al. Discrete dislocation dynamics algorithms and their application in modeling of plastic behaviors of crystalline materials (in Chinese). Chin Sci Bull, 2019, 64: 1864–1877, doi: [10.1360/N972018-01291](https://doi.org/10.1360/N972018-01291)

理机制上描述晶体材料塑性硬化/软化、脆化、损伤、循环塑性、蠕变以及非局部塑性变形等力学响应的位错微结构和材料相关性,从而更加深入地理解晶体材料不同塑性变形行为的内在机理。另一方面,DDD方法能够通过位错长程作用考虑相同滑移系和不同滑移系的弹性交互作用,可以直接考虑位错的背应力,自然地描述材料的自硬化、潜硬化、等向强化和随动强化等现象,从而得到不同加载条件下位错密度演化规律,可以为发展连续介质力学框架下更具有物理机制的塑性本构关系奠定基础。最后,因为DDD中本征地包含“柏氏矢量”这一长度参数,它能够自然而然地描述微尺度塑性中所表现出的强烈的尺度效应,而不需要引入任何人为拟合的特征长度参数。由于以上突出的优点,DDD近20年来已经被广泛地应用于塑性变形及其微尺度效应内在机理的研究当中^[3-9]。需要特别指出的是,DDD忽略了位错芯的原子细节,因此所模拟的尺度能够达亚微米至几十微米的量级,在微观的分子动力学模拟和宏观的连续介质力学模拟之间起到一个桥梁和纽带作用^[10]。

基于以上考虑,本课题组进一步发展和完善了离散位错动力学-有限元(finite element method, FEM)叠加算法、DDD-FEM同步耦合算法(discrete-continuous method, DCM)以及离散位错动力学-扩展有限元(extended finite element method, XFEM))同步耦合算法,并将以上算法应用到单晶镍基高温合金塑性变形响应、晶体材料断裂和损伤机理以及晶体材料塑性行为的微结构效应和尺度效应等问题的研究当中。

1 离散位错动力学算法框架

纯离散位错动力学模拟最早由Kubin等人^[11]、Zbib等人^[12]以及Ghoniem和Sun^[13]等先后所提出。该方法忽略位错的原子细节,依据位错弹性理论将位错视为晶体材料中的线缺陷,通过模拟位错线的动态演化直接模拟晶体材料的塑性响应。其中,位错线的相互作用包含长程作用和短程作用两类。位错长程作用将位错线离散成若干位错段,位错段之间的相互作用通过位错弹性应力场进行考虑。当两位错段距离小于位错芯半径时,位错弹性理论不再适用,此时通过一系列本构法则考虑位错段之间的短程作用(如交截、割阶、湮灭、交滑移等)。在纯DDD框架下,部分学者^[14-17]对位错段的离散、位错长程作用计算以及不同晶体材料

滑移体系(如FCC, BCC和HCP)进行了卓有成效的扩展和研究。然而,纯DDD模拟只能局限在代表性体积胞元框架下,只能考虑周期性边界条件;它能够有效地模拟各种不同位错微结构的形成以及其对材料单向拉压应力-应变响应的影响,但不能对非均匀异质(含孔洞、夹杂以及裂纹等)材料的塑性行为以及非周期条件的微尺度结构(微梁、薄膜、微丝)的力学响应以及复杂加载条件下响应的全边值问题进行计算模拟。这大大限制了纯DDD方法的应用范围,为此纯DDD和FEM或XFEM相互关联的算法被发展起来以求解材料塑性变形边值问题。

1.1 DDD-FEM叠加算法

结合离散位错动力学模拟和有限元方法, Van der Giessen和Needleman^[18]提出了求解二维(2D)塑性边值问题的叠加方案。如图1所示,离散位错模拟DDD模块($\sim$)用于计算无限大连续体中位错的动力学演化,这些位错在力边界条件上会导致力($\tilde{T}$),在位移边界条件上会导致位移($\tilde{U}$)。有限元FEM模块用于求附加弹性场($\sim$),以满足实际边界条件(T_0)和(U_0),因此附加FEM场的所需施加的边界条件为($T_0 - \tilde{T}$)和($U_0 - \tilde{U}$)。图1左边实际塑性边值问题的解可以写为两个弹性场($\sim$)和($\sim$)的叠加:

$$u = \tilde{u} + \hat{u}, \quad \varepsilon = \tilde{\varepsilon} + \hat{\varepsilon}, \quad \sigma = \tilde{\sigma} + \hat{\sigma}, \quad (1)$$

其中,DDD($\sim$)场通过 N 个位错的贡献叠加得到:

$$\tilde{u} = \sum_{i=1}^N u_i, \quad \tilde{\varepsilon} = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i, \quad \tilde{\sigma} = \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2)$$

$\{u_i, \varepsilon_i, \sigma_i\}$ 为第 i 个位错在无限大体的弹性理论解。

基于以上思想, Fivel和Canova^[19]以及Weygand等人^[20]进一步将3D离散位错方法和3D线弹性有限元方法相叠加用于求解3D塑性边值问题。近年来,DDD-FEM叠加算法已被大量用于模拟和分析各种试样(如薄膜、薄夹层、薄梁等)在各种载荷条件下(如弯曲、纯剪、压痕等)塑性变形的微尺度效应及其内在位错机理^[21-24]。以上2D和3D DDD-FEM叠加方案均只考虑了位错的滑移,而忽略了位错的攀移。然而,当温度高于 $0.3T_m$ (T_m 为材料的熔点)时,位错攀移对材料的塑性变形变得尤为重要。为了更加有效地模拟高温下晶体材料的塑性响应, Huang等人^[25]基于空位的稳态扩散解在DDD-FEM叠加方案中引入位错攀移机制,以考虑

图1 (网络版彩色)DDD-FEM叠加算法示意图
Figure 1 (Color online) The schematic of DDD-FEM superposition scheme

高温效应对塑性行为的影响, 位错攀移速度通过下式得到:

$$V_c = \frac{2\pi D_0}{b \ln(R/b)} \exp\left(-\frac{\Delta E_{sd}}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{F_c \Delta V^*/b}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (3)$$

其中相关参数请参考Huang等人^[25]的报道. 众所周知, 位错滑移是一个快速过程, 而位错攀移是一个慢速过程, 两者在时间尺度上不匹配. 我们采用滑移时间步 dt 和攀移时间步 dT 双时间步长方案, 取 $dT=100dt$ 解决这一时间不匹配的问题. 在滑移步内, 计算位错滑移距离和攀移距离, 但只更新滑移导致的位错位置改变, 此时位错攀移距离只累积但不引起位错位置的改变. 在攀移时间步内, 当累积位错攀移距离大于原子密排面间距时, 位错攀移实际发生, 更新位错到平行的滑移面上. 为了保证攀移后能够准确计算位错的位移场, 每当攀移发生, 在攀移前后的两个滑移面上引入正负反号的两个虚拟位错. 在本方案的基础上, Ayas等人^[26]进一步将位错视为空位的源和汇, 将空位扩散对攀移的影响引入到DDD-FEM叠加方案中, 计算精度得到一定程度增加, 但计算量也大大增加.

此外, DDD-FEM叠加方案还广泛地应用于多晶材料塑性行为, 尤其是多晶材料晶粒尺度效应(Hall-Petch效应)的研究中^[27,28]. 然而, 这些研究都基于一个基本假设, 即多晶材料的晶界对位错而言是纯刚性的, 位错到达晶界后只能被阻碍住, 不能够进一步穿透晶界. 大量实验已经证明, 在一定条件下位错能够穿透晶界, 并显著改变多晶材料的塑性行为. 基于此考虑, Li等人^[29]在DDD-FEM框架下引入了位错-晶界交互作用模型. 位错如果穿透晶界, 其上的分切应力需要满足以下临界

条件:

$$\tau b_1^2 \geq \tau_{pass} b_1^2 = E_{gb} b_1 + \alpha G (\Delta b)^2, \quad (4)$$

其中 E_{gb} 为晶界能, 其取值与晶粒A和晶粒B取向值有关, 具体取值和其他参数请参考Li等人^[29]的建议. 该晶界穿透模型已被众多学者应用到多晶材料不同载荷下的力学响应的DDD模拟中^[30,31], 丰富了DDD-FEM叠加方案的模拟计算能力. 如图2所示, 当晶粒A在滑移系 S_1 上位错的分切应力满足式(4)时, 该位错能够穿透晶界滑移到晶粒B的滑移系 S_2 上, 在晶界处留下一个柏氏矢量为 $\Delta b = b_1 - b_2$ 的残余位错. 当残余位错积累到一定程度时, 晶界会进一步向晶粒内部发射位错, 以降低晶界的能量.

然而, 虽然DDD-FEM叠加算法在晶体材料塑性行为的模拟中得到了大量的应用, 但其缺陷也是非常显著的. (1) 该方法处理非均质材料非常麻烦, 需要额外计算非均质相引起的所谓的“极化应力”, 大大降低了

图2 位错穿透晶界模型
Figure 2 The dislocation-grain boundary penetration model

计算效率; (2) 该方法不能很好地考虑不同晶向导致的塑性各向异性; (3) 如果不采用快速多级算法和并行处理, 计算量在 $O(N^2)$ 量级, 计算量相对较大; (4) 该算法需在力和位移边界条件处进行修正以求解FEM协调场, 但当位错靠近界面或在变形梯度较大的界面附近(如裂纹)时, 所得修正FEM有限元场并不准确, 甚至可能出错. 为了克服DDD-FEM叠加算法的上述缺点, 以下DDD-FEM直接耦合算法被学者们发展出来, 并不断完善.

1.2 DDD-FEM直接耦合算法

如图3所示, 不同于DDD-FEM叠加算法, DDD-FEM直接耦合算法虽然也包含DDD模块和FEM模块, 但是两者并不互相叠加, 而是通过信息传递进行互相耦合^[32-35]. 首先, DDD模块计算离散位错段的演化, 并通过下式得到由位错运动演化导致的塑性应变增量:

$$\Delta \mathbf{E}_p = \frac{\Delta S}{2V_{\text{reg}}} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{b} + \mathbf{b} \otimes \mathbf{n}), \quad (5)$$

其中 ΔS 为位错扫过的面积, $\mathbf{n}$ 为滑移面的法向矢量, $\mathbf{b}$ 为位错的柏氏矢量. DDD模块所得塑性应变增量 $\Delta \mathbf{E}_p$ 作为特征应变需要分配到FEM模块中去, 式(5)中 V_{reg} 就是塑性应变分配区域 Ω_{reg} 的体积. 我们^[36]首先采用长椭圆塑性应变分配区域, 其中两个短轴 a_i 在滑移面上, 长轴 b_i 垂直于滑移面, 以避免后续计算位错应力场时需要进行一个费时的卷积处理. 位错划过区域 $d\mathbf{s}$ 所导致的塑性应变增量通过以下分配函数分配到 Ω_{reg} 的高斯点上:

$$\Delta \varepsilon_p(\mathbf{x}) = \omega(\mathbf{x}) \Delta \mathbf{E}_p, \quad \omega(\mathbf{x}) = \frac{A}{(r_{\text{eff}}^2 + 1)^{3.5}}. \quad (6)$$

以上分配函数借鉴Cai等人^[37]所提出的位错柏氏矢量分布函数得到, 具体参数及其取值请参考Huang等人^[36]的工作. 此外, 为了研究材料自由表面或界面对塑性应变分配的影响, 通过采用在自由表面或两相界面外引入虚拟位错的方法以弥补由于表面和界面对分配区域 Ω_{reg} 截断可能导致的塑性应变分配丢失^[36].

FEM得到DDD传递过来的塑性应变后, 通过以下控制方程来求解边值问题和位错的长程弹性应力场:

$$\int_V \mathbf{B}^T \mathbf{D} \mathbf{B} dV \mathbf{u} = \mathbf{f}_c + \int_V \mathbf{B}^T \mathbf{D} \varepsilon_p dV - \int_V \mathbf{B}^T \sigma_0 dV, \quad (7)$$

其中 ε_p 为DDD传递和分配过来的特征塑性应变, σ_0 为初始位错导致的预应力, 其他参数的物理意义请参见

图3 (网络版彩色)DDD-FEM直接耦合算法示意图
Figure 3 (Color online) The schematic of DDD-FEM direct coupling scheme

Huang等人^[36,38]的工作. DCM第二个关键过程是以上FEM模块所求得的应力场如何传递给DDD模块以驱动位错进一步的运动和演化. 传统的DCM通过有限元插值直接计算位错段上的应力场, 然而这样的插值会大大低估位错的应力场, 这种低估在位错芯所在单元尤为显著. 因此, 为了能够准确地描述位错之间的相互作用, 传统的DCM方法需要FE网格足够精细, 至少保证所有位错都在不同的单元内部. 但对于位错密度较高, 或者局部位错密度较高的情形(如晶界或其他界面处位错塞积的情形), FE网格需要精细到计算量难于接受的程度. 可见, 传统的DCM方法处理高位错密度情况和富含界面的材料是不太合适的. 为此, 引入所谓的截断半径并通过下式计算任一位错段 n 上的应力场, 并传递给DDD模块以驱动任一位错段 n 的进一步演化和运动:

$$\Sigma_n = \sigma^{\text{FE}}(\mathbf{x}_n) + \sum_{i \in S_n} \sigma_i^{\text{TE}}(\mathbf{x}_n) - \sum_{i \in S_n} \mathbf{P}_i^{\text{FE}}(\mathbf{x}_n, a), \quad (8)$$

其中 $\sigma^{\text{FE}}(\mathbf{x}_n)$ 为位错段 n 上的有限元FE插值解, $\sigma_i^{\text{TE}}(\mathbf{x}_n)$ 为截断球体 S_n 内位错段 i 在位错段 n 上导致应力的奇异理论解, $\mathbf{P}_i^{\text{FE}}(\mathbf{x}_n, a)$ 为位错段 i 在位错段 n 上导致应力的非奇异理论解^[37], a 为与网格相关的等效位错芯半径.

通过以上塑性应变分配和位错段应力计算的特殊考虑, 所发展的DCM方案能够较好地考虑表面和界面的影响, 避免传统DCM由于塑性应变分配在表界面处理不当而导致的虚假硬化现象; 由于所发展的扩展DCM引入了截断半径的概念, 位错段上应力场的计算

不再敏感于FE网格大小,即使两个位错在同一单元,其相互作用仍然能够通过式(8)后两项准确考虑,算法可以使用较粗的FE网格从而显著降低计算量.此外,由于截断半径的引入,FE时间步长可以数十倍于离散位错动力学DDD时间步长,大大减少了FE模块的调用次数,从而显著地提高了位错动力学模拟的计算效率.

然而,虽然所发展的DCM方法具有以上的众多优点,其不足之处也是需要注意的.首先,DCM方法需要在FE网格之间进行塑性应变分配,这就要求FE网格的尺寸比较均匀,这对于某些必须使用梯度网格(即网格尺寸变化)的情形就不再适用.其次,对于急剧变化的表面或界面(如裂纹等),DCM方法不能合理地分配塑性应变,因此DCM不再适用.基于以上考虑,发展了DDD和XFEM的耦合算法,从而更加合理地进行非均匀网格以及具有丰富强/弱界面(如裂纹)材料塑性问题的模拟.

1.3 DDD-XFEM直接耦合算法

扩展有限元是由Belytschko和Black^[39]在1999年针对强/弱界面(如裂纹、孔洞、夹杂、晶界、相界)问题而提出来的.对于强弱界面问题,XFEM的优势在于对界面问题不需要特别的网格划分;对于裂纹和界面的演化,不需要重新划分网格;通过裂尖扩充场能准确地描述裂尖应力场的奇异性.正是由于XFEM这些优点,它在脆性材料的断裂问题中得到了广泛的应用.然而,XFEM在描述裂尖变形场时需要解析项作为裂尖扩充基函数,但对于韧性材料裂尖这一基函数的选择存在一定的困难.我们的思路是,如果塑性部分通过DDD模拟得到,对于韧性裂纹裂尖XFEM的扩充基函数仍然采用弹性裂尖理论解进行,那么这一问题就能够得到有效的解决.

位错的运动同样在滑移面上导致了位移不连续,这与裂纹上下表面的位移不连续性类似.不同于裂纹面的位移不连续性是未知的,位错滑移面上下两点的位移不连续性是一个定值,即 $u_A - u_B$ 等于位错柏氏矢量的大小.既然XFEM能够适用于裂纹问题的研究,也应该能够适用于位错运动演化的计算和模拟.Gracie等人^[40,41]先后提出了仅包含阶跃扩充和既包含阶跃扩充又包含位错芯扩充的位错XFEM方法.但是,他们提出的方法都只是针对单个位错的,位错滑移面都是平行于有限元网格的,且不能考虑晶体各向异性的影响.另外,他们的XFEM方法如果只考虑阶跃扩充,临近位错

的交互作用就不能准确考虑;如果既考虑阶跃扩充又考虑位错芯扩充,位错的交互作用能够准确考虑,但计算效率却大大降低.

针对现有算法的不足,首先引入开关函数 $T(\mathbf{x})$, $W(\mathbf{x})$ 和考虑各向异性的位错芯扩充函数,任意点的位移场可由下式计算获得:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \sum_{I \in \zeta} N_I(\mathbf{x}) \mathbf{u}_I + \sum_{J \in \zeta^a} \Phi_J(\mathbf{x}) \mathbf{b} + \sum_{J \in S^a} \Psi_J(\mathbf{x}) \mathbf{b}, \\ \Psi_J(\mathbf{x}) &= [1 - W(\mathbf{x})] T(\mathbf{x}) \Phi_J(\mathbf{x}) + W(\mathbf{x}) T(\mathbf{x}) \Theta_J(\mathbf{x}), \\ T(\mathbf{x}) &= \begin{cases} 0 & N_{\text{er}}^{\text{all}} < 4, \\ 1 & N_{\text{er}}^{\text{all}} = 4, \end{cases} \quad W(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & N_{\text{er}}^{\text{core}} < 4, \\ 1 & N_{\text{er}}^{\text{core}} = 4, \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $\Phi_J(\mathbf{x})$ 为阶跃扩充形函数, $\Psi_J(\mathbf{x})$ 为考虑晶体各向异性的位错芯扩充形函数.由于引入开关函数和新的位错芯扩充形函数,本文所发展的XFEM方法能很好地考虑晶体各向异性的影响,且能很好地处理位错在倾斜滑移系上的情形,这对大规模DDD模拟尤为重要.然而,以上改进的XFEM算法虽然能够考虑大规模DDD计算中晶体各向异性的影响,但位错芯扩充积分计算量较大,为此进一步完善了DDD-XFEM耦合算法.我们忽略了位错芯扩充,而采用了分段线性阶跃扩充以减少计算量.

忽略位错芯扩充后,虽然计算效率大大提高,但XFEM所得位错应力场在位错芯附近单元处变得不再准确.为了模拟高位错密度情形,有效捕捉位错在界面附近的塞积,在DDD-XFEM耦合算法中同样引入了截断半径的概念.对于特定参考点 $\mathbf{x}$,截断半径外位错对其应力贡献通过式(10)第一项FEM插值解直接得到;截断半径内位错对其应力贡献需要通过第二和第三项修正得到.

$$\begin{aligned} \sigma(\mathbf{x}) &= C \left(\mathbf{B} \mathbf{u}^{\text{FE}} + \sum_{i=1}^K \mathbf{E}_i \boldsymbol{\mu}_i^{\text{b}} \right) \\ &\quad - \sum_{j \in A_x} \sum_{l=1}^L \left[N_l(\mathbf{x}) \sigma_j^{\text{non}}(\mathbf{x}_l, h_c) \right] + \sum_{j \in A_x} \sigma_j^{\text{sig}}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $\sigma_j^{\text{non}}(\mathbf{x}_l, h_c)$ 为与网格尺寸 h_c 相关的位错Peierls-Nabarro非奇异解, $\sigma_j^{\text{sig}}(\mathbf{x})$ 为奇异理论解,更多细节请参考文献[42].

采用以上进一步发展的DDD-XFEM算法能够方便地考虑如图4(a)所示位错和裂尖的交互作用,准确捕捉裂尖位错屏蔽应力场,这是前述DCM算法难于有效刻画和描述的;该方法还能够自然地考虑如图4(b)所示位

图4 DDD-XFEM算法模拟所得与界面交互作用位错的应力场解。(a) 裂尖发射位错；(b) 穿透晶界位错

Figure 4 The stress fields of dislocations interacting with different interfaces solved by DDD-XFEM coupling algorithm. (a) Dislocation emitted from crack tip; (b) dislocation penetrating the grain boundary

错穿过晶界在晶界上留下残余位错的应力场，不需要任何额外的特殊处理。

此外，由于式(10)中后两项的引入，本文所发展的DDD-XFEM算法对网格尺寸不太敏感；同上述DCM方案一致，扩展有限元时间步长可以数十倍于DDD时间步长，大大减少了XFEM的计算量，这两方面都能显著提高计算效率。可见，本文发展的DDD-XFEM算法可应用于富含裂纹、晶界、孔洞、夹杂等强弱界面材料塑性行为的大规模模拟中。需要特别指出的是，本文提出的DDD-XFEM还在进一步发展中，下一步会将位错和裂纹统一采用XFEM和水平集函数进行描述，并和内聚力单元有机耦合起来，在XFEM框架下统一考虑塑性材料裂纹的扩展演化。

综上所述，DDD-FEM叠加方案、DDD-FEM直接耦合方案以及DDD-XFEM耦合方案各有其独特的优势。采用以上方法，对“高温合金塑性变形机理”、“晶体材料断裂和损伤”以及“塑性变形微尺度/微结构效应”等问题进行了研究，下面将进行简单概述。

2 离散位错动力学模拟的应用

2.1 单晶镍基高温合金塑性变形机理研究

单晶镍基高温合金被广泛地应用于航空发动机和燃气轮机的涡轮叶片中，具独特的 γ 和 γ' 两相微结构；两相微结构均处于亚微米量级，其晶格类型相同，晶格常数相近，形成所谓的共格界面。正是由于以上独特的两相材料微结构，单晶镍基高温合金表现出优良的高温

强度(随温度升高屈服强度反常增加)、抗蠕变、抗疲劳、各向异性、加载率效应、拉压不对称性等独特的力学性能^[43,44]。只有充分认识单晶镍基高温合金力学行为的内在材料微结构和位错微结构机理，才能更好地建立包含底层位错机制的塑性本构关系^[45]，为该材料的强度分析和安全评定提供更合理的理论和计算工具支持。

基于以上考虑，采用DDD-FEM叠加算法，对单晶镍基高温合金的强化机理进行了研究^[46]。如图5(a)所示，DDD模拟所得位错网络结构与实验观察结果相吻合。深入分析表明，虽然位错交截、“V”型位错结构以及位错割阶等与材料强化的位错结构都能够被观察到，但它们的密度都非常低，应该不是强化的主要机制。通过对位错网络进行Nye张量分析发现，两相界面位错网络存在显著的极性，这种极性导致强大的背应力，阻止后续位错进入基体通道，导致材料的强化。因此，界面形成的位错网络应该是该材料强化的重要机理。

实验表明，单晶镍基高温合金在[001]方向加载时呈现出双阶段塑性变形的情况，即首先塑性强化，然后趋于理想流动。离散位错动力学模拟表明，这一现象与图5(b)所示超位错对切过 γ' 沉淀相密切相关；不考虑超位错对切过沉淀相时，塑性强化会一直持续下去，而当超位错对开始切过沉淀相后则表现为塑性理想流动。可见，单晶镍基高温合金的本构要合理描述该材料的塑性行为，必须合理引入位错切过沉淀相的机制。

此外，通过开展[100]和[111]方向加载的离散位错动力学模拟，对单晶镍基高温合金塑性变形各向异性

图5 (网络版彩色)离散位错动力学模拟所得位错结构。(a) 位错网络结构; (b) 超位错对切过沉淀相结构; (c) [001]加载位错结构; (d) [111]加载位错结构。图中坐标单位为 b , 即柏氏矢量大小

Figure 5 (Color online) The dislocation structures simulated by DDD. (a) Dislocation network structure; (b) super-dislocation pair cutting the precipitate; the dislocation structures for [001] loading (c) and for [111] loading (d)

的位错机理进行了探讨。与[100]方向加载时的双阶段塑性响应不同, [111]方向加载时塑性屈服应力较低, 且没有强化阶段, 屈服后一直理想流动, 这与实验现象是吻合的。以上不同塑性变形响应与不同加载方向下所形成的不同微结构密切相关。如图5(c)和(d)所示, 在[001]方向加载下, 位错密度在基体各个通道内基本相同, 位错呈现交叉网络结构, 缠绕包裹沉淀相; 而在[111]方向加载下, 位错则集中在水平集体通道内, 呈现平行的条带状, 且不具有极性, 不引起塑性硬化响应。可见, 单晶镍基高温合金的本构要合理描述其塑性各向异性行为, 必须对不同通道内的位错密度分别进行考虑。

所开展的离散位错动力学模拟还表明, [111]方向加载下宏观的水平立方滑移可由连续交替的微观八面体滑移组合而实现, 这与进一步开展SEM电子显微镜实验观察到的现象是吻合的。可见, 单晶镍基高温合金的立方滑移可能只是表现的, 它本质上仍然应该是由八面体滑移所组成。基于以上考虑, 后续发展的该材料塑性本构关系中只考虑八面体滑移系, 通过引入交滑移导致的连续微观八面体滑移考虑宏观立方滑移的贡

献。通过在DDD模块中引入位错攀移, 还深入探讨了攀移机制对镍基高温合金塑性行为的影响^[47]。结果表明: 与交滑移机制类似, 位错攀移同样能引起材料的表观立方滑移; 位错攀移是引起加载率相关性和拉压不对称性的重要机制。因此, 该材料晶体塑性本构中考虑位错攀移也是必需的。

此外, 基体和沉淀相虽然是共格的, 但它们之间还存在一定的晶格失配, 导致界面位错失配网络的产生。为了研究位错失配网络对该材料塑性屈服和强化响应的影响^[48], 开展了相关的DDD模拟和分析。结果表明, 位错失配网络所造成的应力虽然会被晶格不匹配应力所部分抵消, 界面失配网络对位错Orowan弓出进入通道仍然具有显著的阻碍作用, 影响着材料的强化和蠕变。在此基础上, 对位错在通道弓出所需的临界应力公式修正如下:

$$\tau_{\text{CRSS}}^{\text{gl}} = c_1 \frac{A\mu b}{2\pi w} \ln\left(\frac{w}{r_0}\right) + c_2 \frac{\mu b}{w} \left[\ln\left(\frac{w}{r_0}\right) + c_3 \right] |\delta|, \quad (11)$$

式中 δ 为两相晶格失配系数, w 为基体通道宽度, 其他参数请参考Huang 等人^[48]的工作。显然, 式(11)可直接应

用于镍基高温合金本构关系的开发中。

本课题组还通过离散位错动力学模拟研究了中低温下超内禀层错切过沉淀相对材料强化的影响^[49],研究了沉淀相KW锁形成和解锁对材料随温度升高反常屈服的影响^[50],探讨了位错分解成偏位错和层错对该材料强化的影响^[51]。在此基础上,充分认识了该材料塑性变形的介观位错机理,发展了基于位错密度为内变量,考虑材料两相微结构,考虑位错弯弓滑移、攀移、交滑移、位错切过沉淀相、KW锁等机制,融入位错的增殖、转换和湮灭的单晶镍基高温合金晶体塑性本构关系^[52]。采用一套统一的本构参数,该本构关系能够合理地描述材料的反常屈服、拉压不对称性、各向异性塑性、加载率效应、温度相关性、蠕变、循环塑性等响应。该本构关系具备丰富的底层位错信息和较为扎实的物理基础,为单晶镍基高温合金材料结构的强度和安全分析提供了新的选择。

2.2 晶体材料断裂和损伤问题研究

晶体材料的损伤破坏包含孔洞形核、长大、聚合成微裂纹以及微裂纹扩展几个典型的过程。这几个过程都伴随着位错的演化和塑性变形的发生,充分认识这些过程中所包含的丰富微结构信息和位错机制对于深入认识晶体材料的损伤和断裂破坏具有重要的科学意义。有鉴于此,采用DDD-FEM叠加算法,对微损伤孔洞长大的位错机制及其尺度效应^[53]进行了系统的研究。结果表明:(1)微损伤孔洞通过对应滑移系上的位错对进入孔洞而实现长大;(2)孔洞长大呈现出强烈的尺度效应,孔洞越小其长大越慢;(3)微孔洞长大方式往往是间歇式和蛙跳式的,所得结果对于建立基于位错机制的微孔洞长大模型具有重要的指导意义。

采用DDD-FEM叠加算法,本课题组^[25]还研究了多晶材料裂纹端部场的位错机理。通过引入位错晶界穿透和位错攀移,详细探讨了裂尖局部区域的变形模式和棘轮效应。研究结果表明:(1)如图6(a)和(b)所示,裂尖区域棘轮响应具有显著的离散型,因此损伤累积也具有强烈的离散性,棘轮效应显著区域为裂纹扩展的潜在方向和位置;(2)相较于位错穿透晶界,位错攀移是引起材料棘轮效应和加载率效应主要的影响因素;(3)如图6(c)所示,裂尖区域晶粒为多滑移变形,而远离裂尖区域晶粒则为单滑移变形。

采用同样的DDD-FEM叠加算法,对裂纹和裂尖孔洞损伤的交互作用进行了模拟^[54]。我们观察到I型载荷

作用下裂尖形成了如图6(d)所示的两条水平滑移带。这表明,由于裂尖和孔洞的交互作用,I型裂纹也有可能通过剪切的方式进行扩展。进一步,如图6(e)和(f)所示,采用DDD-XFEM耦合算法并结合内聚力模型,还模拟了裂尖位错发射对单晶材料I型裂纹扩展的影响^[42]。结果表明:裂尖位错发射的屏蔽作用对裂纹扩展起着至关重要的作用;微观上裂纹呈现出蛙跳式扩展方式;现有的DDD-FEM模拟裂纹扩展时,由于不能很好地考虑位错对裂尖的屏蔽作用,可能过高地估计了材料的断裂韧性。此外,本课题组^[55]还对不同晶粒大小多晶材料裂尖的位错构型和变形场进行了模拟研究。这部分的工作有助于人们深入认识晶体材料微孔洞损伤、裂尖塑性变形和裂纹扩展的内在位错机制。

2.3 塑性行为的微尺度效应和微结构效应研究

采用DDD-FEM直接耦合算法,对单晶和双晶微柱压缩行为进行了模拟^[36]。压缩应力-应变曲线体现出强烈的尺度效应和应变突跳效应;应变突跳和有无晶界以及晶界类型密切相关;如图7(a)~(c)所示,位错构型也与晶界和晶界的类型关系紧密;如图7(d),(e)所示,单晶微柱压缩时主要是单滑移系激活,微柱上下相对滑移,而双晶压缩时,微柱至少4个滑移系同时启动,且产生扭转变形,在晶界处导致切应力,这也许是实验中观察到晶界错动开裂的原因。

采用DDD-FEM直接耦合方法,对图8(a)所示非均质Cu/Al多层金属薄膜塑性行为及其尺度效应进行了研究^[38]。计算结果表明:(1)位错攀移和温度效应能够显著改变Cu/Al多层膜中的位错结构(如图8(b)和(c)所示);(2)位错攀移和温度效应使得变形更加不均匀;(3)如图8(d)所示高温条件下,多层金属多层膜的应力-应变曲线与薄膜厚度的尺度效应显著减弱。显然,温度效应显著地改变了位错与非均质材料微结构的交互作用,使得变形不均匀和局部化现象变得更为显著,同时通过松弛位错塞积能够显著地减弱多层薄膜厚度效应,尺度效应相关参数在高温下应予以改变。

同样采用DDD-FEM直接耦合方法,还对高温条件下多晶材料屈服应力的晶粒尺度效应进行了研究,详细探讨了位错攀移的影响^[56]。计算结果显示,由于位错塞积被位错攀移过程所松弛,晶粒的Hall-Petch效应显著降低,当晶粒足够小时,这一降低变得更加明显。此外,还对微梁的拉弯载荷下的循环变形尺度效应^[57,58]、微纳米压痕的尺度效应及其内在机理进行了

图6 裂纹问题的离散位错动力学模拟。(a) 多晶材料裂纹模型; (b) 裂尖棘轮效应; (c) 裂尖滑移模式; (d) 裂纹-裂尖孔洞交互形成水平剪切带; (e) 含内聚力单元裂纹扩展模型; (f) 裂纹扩展形成位错发射结构

Figure 6 The DDD simulations for crack problems. (a) DDD crack model for polycrystalline materials; (b) simulated ratchetting responses near the crack tip; (c) crack-tip dislocation slip trace; (d) horizontal dislocation shear band between the crack tip and the void; (e) crack propagation model with cohesive zone element; (f) emitted dislocation structure by crack growth

位错动力学模拟^[59,60], 深入地探讨了几何必需位错、位错饥饿、位错源截断、材料微结构对材料塑性变形微尺度效应的影响。

3 总结与展望

离散位错动力学通过直接模拟大量位错段的运动

图7 微柱压缩的DDD模拟。(a) 单晶微柱位错构型; (b) 可吸收位错晶界微柱位错构型; (c) 刚性晶界微柱位错构型; (d) 单晶微柱滑移带; (e) 双晶微柱滑移带

Figure 7 The DDD results for micropillar compression. (a) Dislocation configurations for single crystal micropillar; polycrystalline micropillar with dislocation-absorbed grain boundary (GB) (b) and with the rigid GB (c); slip bands for single crystal micropillar (d) and bi-crystal micropillar (e)

演化来模拟晶体材料的塑性变形, 因此能捕捉位错-材料微结构的交互作用以及位错微结构的形成, 是研究材料塑性变形内在位错机理、尺度效应以及材料微结构相关性的有效手段. 同时, 离散位错动力学所能够模拟的尺度处于微观分子动力学模拟和宏观有限元模拟之间, 起到一个承上启下的桥梁作用. 离散位错动力学模

拟中部分参数需要通过分子动力学模拟得到, 而离散位错动力学模拟所得变形位错机制和位错密度演化规律又可以传递给包含底层信息的宏观塑性本构关系. 本课题组发展和完善了二维/三维DDD-FEM叠加算法、DDD-FEM直接耦合算法以及DDD-XFEM耦合算法. 使用以上DDD算法, 首先系统探讨了单晶镍基高温

图8 Cu/Al金属多层膜离散位错动力学模拟。(a)模型;(b)不考虑攀移位错构型;(c)考虑攀移位错构型;(d)位错攀移对屈服应力晶粒尺度效应的影响

Figure 8 The DDD modeling on the Cu/Al metallic multilayered film. (a) Simulation model; dislocation configurations without (b) and with (c) consideration of the dislocation climb; (d) dependence of yield stress on the grain size with and without considering the dislocation climb

合金塑性变形丰富的内在位错机理,并在此基础上建立了包含材料微结构信息和位错演化信息的晶体塑性本构关系;其次,深入研究了晶体材料断裂和损伤的内在位错机制;最后,详细探究了非均质材料塑性变形的微结构和微尺度相关性的内在机理。

目前,在氢和其他化学环境下(氧化和液态金属环境),位错动力学与氢/空位扩散的耦合算法及应用正引起广泛关注。在高速冲击下,位错的短程作用、位错与界面的交互作用、位错的长程作用、位错的形核、位错运动与温度的相互关系也发生变化,如何建立高速

冲击下有效的离散位错动力学框架体系也是亟待解决的关键问题之一。此外,在核环境中子辐照条件下,如何建立高效的位错-多维多尺度辐照缺陷交互作用模型和离散位错动力学算法,使之能够更好地研究核环境条件下金属材料塑性性能退化机理也是当前研究的热点之一。总之,位错动力学及其与FEM或XFEM耦合方法是研究晶体材料在极端条件下(高温、高应变率、化学腐蚀环境、高辐照等)塑性行为及其内在机理的有效手段,值得金属学学者和力学工作者的进一步关注和研究。

参考文献

- 1 Tinga T, Brekelmans W A M, Geers M G D. Cube slip and non-Schmid effects in single crystal Ni-base superalloys. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2010, 18: 015005
- 2 Xiao X, Song D, Xue J, et al. A size-dependent tensorial plasticity model for FCC single crystal with irradiation. *Int J Plast*, 2015, 65: 152–167
- 3 Bertin N, Upadhyay M V, Pradalier C, et al. A FFT-based formulation for efficient mechanical fields computation in isotropic and anisotropic periodic discrete dislocation dynamics. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2015, 23: 065009
- 4 Fan H, Aubry S, Arsenlis A, et al. Grain size effects on dislocation and twinning mediated plasticity in magnesium. *Script Mater*, 2016, 112: 50–53
- 5 Gao S, Fivel M, Ma A, et al. Influence of misfit stresses on dislocation glide in single crystal superalloys: A three-dimensional discrete dislocation dynamics study. *J Mech Phys Solids*, 2015, 76: 276–290
- 6 Liu F, Liu Z, Lin P, et al. Numerical investigations of helical dislocations based on coupled glide-climb model. *Int J Plast*, 2017, 92: 2–18
- 7 Liu F X, Liu Z L, Pei X Y, et al. Modeling high temperature anneal hardening in Au submicron pillar by developing coupled dislocation glide-climb model. *Int J Plast*, 2017, 99: 102–119
- 8 Zheng Z, Balint D S, Dunne F P E. Mechanistic basis of temperature-dependent dwell fatigue in titanium alloys. *J Mech Phys Solids*, 2017, 107: 185–203
- 9 Gagel J, Weygand D, Gumbsch P. Discrete dislocation dynamics simulations of dislocation transport during sliding. *Acta Mater*, 2018, 156: 215–227
- 10 Rousseau T, Nougier-Lehon C, Gilles P, et al. Finite element multi-impact simulations using a crystal plasticity law based on dislocation dynamics. *Int J Plast*, 2018, 101: 42–57
- 11 Kubin L P, Canova G, Condat M, et al. Dislocation microstructures and plastic flow: A 3D simulation. *Solid State Phenom*, 1992, 23-24: 455–472
- 12 Zbib H M, Rhee M, Hirth J P. On plastic deformation and the dynamics of 3D dislocations. *Int J Mech Sci*, 1998, 40: 113–127
- 13 Ghoniem N M, Sun L Z. Fast-sum method for the elastic field of three-dimensional dislocation ensembles. *Phys Rev B*, 1999, 60: 128–140
- 14 Ghoniem N M, Tong S H, Sun L Z. Parametric dislocation dynamics: A thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation. *Phys Rev B*, 2000, 61: 913–927
- 15 Arsenlis A, Cai W, Tang M, et al. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2007, 15: 553–595
- 16 Wang Z Q, Beyerlein I J. An atomistically-informed dislocation dynamics model for the plastic anisotropy and tension-compression asymmetry of BCC metals. *Int J Plast*, 2011, 27: 1471–1484
- 17 Fan H, Aubry S, Arsenlis A, et al. The role of twinning deformation on the hardening response of polycrystalline magnesium from discrete dislocation dynamics simulations. *Acta Mater*, 2015, 92: 126–139
- 18 Van der Giessen E, Needleman A. Discrete dislocation plasticity: A simple planar model. *Model Simul Mater Sci Eng*, 1995, 3: 689–735
- 19 Fivel M C, Canova G R. Developing rigorous boundary conditions to simulations of discrete dislocation dynamics. *Model Simul Mater Sci Eng*, 1999, 7: 753–768
- 20 Weygand D, Friedman L H, Van der Giessen E, et al. Discrete dislocation modeling in three-dimensional confined volumes. *Mater Sci Eng-A*, 2001, 309-310: 420–424
- 21 Espinosa H D, Panico M, Berbenni S, et al. Discrete dislocation dynamics simulations to interpret plasticity size and surface effects in freestanding FCC thin films. *Int J Plast*, 2006, 22: 2091–2117
- 22 Motz C, Dunstan D J. Observation of the critical thickness phenomenon in dislocation dynamics simulation of microbeam bending. *Acta Mater*, 2012, 60: 1603–1609
- 23 Velayarce J R, Zamanzade M, Abad O T, et al. Influence of single and multiple slip conditions and temperature on the size effect in micro bending. *Acta Mater*, 2018, 154: 325–333
- 24 Tarleton E, Balint D S, Gong J, et al. A discrete dislocation plasticity study of the micro-cantilever size effect. *Acta Mater*, 2015, 88: 271–282
- 25 Huang M, Tong J, Li Z. A study of fatigue crack tip characteristics using discrete dislocation dynamics. *Int J Plast*, 2014, 54: 229–246
- 26 Ayas C, van Dommelen J A W, Deshpande V S. Climb-enabled discrete dislocation plasticity. *J Mech Phys Solids*, 2014, 62: 113–136
- 27 Ohashi T, Kawamukai M, Zbib H. A multiscale approach for modeling scale-dependent yield stress in polycrystalline metals. *Int J Plast*, 2007, 23: 897–914
- 28 Balint D S, Deshpande V S, Needleman A, et al. Discrete dislocation plasticity analysis of the grain size dependence of the flow strength of polycrystals. *Int J Plast*, 2008, 24: 2149–2172
- 29 Li Z, Hou C, Huang M, et al. Strengthening mechanism in micro-polycrystals with penetrable grain boundaries by discrete dislocation dynamics simulation and Hall-Petch effect. *Comput Mater Sci*, 2009, 46: 1124–1134
- 30 Waheed S, Zheng Z, Balint D S, et al. Microstructural effects on strain rate and dwell sensitivity in dual-phase titanium alloys. *Acta Mater*, 2019, 162: 136–148
- 31 Bai Q, Bai J, Hu C, et al. Investigation on the dislocation evolution in nanoindentation with 2.5D discrete dislocation dynamics simulation and experiment. *Mater Sci Eng-A*, 2018, 730: 84–91
- 32 Vattré A, Devincre B, Feyel F, et al. Modelling crystal plasticity by 3D dislocation dynamics and the finite element method: The discrete-continuous model revisited. *J Mech Phys Solids*, 2014, 63: 491–505

- 33 Lemarchand C, Devincere B, Kubin L P. Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics. *J Mech Phys Solids*, 2001, 49: 1969–1982
- 34 Liu Z L, Liu X M, Zhuang Z, et al. A multi-scale computational model of crystal plasticity at submicron-to-nanometer scales. *Int J Plast*, 2009, 25: 1436–1455
- 35 Jamond O, Gatti R, Roos A, et al. Consistent formulation for the discrete-continuous model: Improving complex dislocation dynamics simulations. *Int J Plast*, 2016, 80: 19–37
- 36 Huang M, Liang S, Li Z. An extended 3D discrete-continuous model and its application on single- and bi-crystal micropillars. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2017, 25: 035001
- 37 Cai W, Arsenlis A, Weinberger C R, et al. A non-singular continuum theory of dislocations. *J Mech Phys Solids*, 2006, 54: 561–587
- 38 Huang M, Li Z. Coupled DDD-FEM modeling on the mechanical behavior of microlayered metallic multilayer film at elevated temperature. *J Mech Phys Solids*, 2015, 85: 74–97
- 39 Belytschko T, Black T. Elastic crack growth in finite elements with minimal remeshing. *Int J Numer Meth Eng*, 1999, 45: 601–620
- 40 Belytschko T, Gracie R. On XFEM applications to dislocations and interfaces. *Int J Plast*, 2007, 23: 1721–1738
- 41 Gracie R, Oswald J, Belytschko T. On a new extended finite element method for dislocations: Core enrichment and nonlinear formulation. *J Mech Phys Solids*, 2008, 56: 200–214
- 42 Liang S, Zhu Y X, Huang M S, et al. Simulation on crack propagation vs. crack-tip dislocation emission by XFEM-based DDD scheme. *Int J Plast*, 2019, 114: 87–105
- 43 Fedelich B. A microstructural model for the monotonic and the cyclic mechanical behavior of single crystals of superalloys at high temperatures. *Int J Plast*, 2002, 18: 1–49
- 44 Tinga T, Brekelmans W A M, Geers M G D. Incorporating strain gradient effects in a multiscale constitutive framework for nickel-base superalloys. *Philos Mag*, 2008, 88: 3793–3825
- 45 McDowell D L, LeSar R A. The need for microstructure informatics in process-structure-property relations. *MRS Bull*, 2016, 41: 587–593
- 46 Huang M, Zhao L, Tong J. Discrete dislocation dynamics modelling of mechanical deformation of nickel-based single crystal superalloys. *Int J Plast*, 2012, 28: 141–158
- 47 Yang H, Huang M, Li Z. The influence of vacancies diffusion-induced dislocation climb on the creep and plasticity behaviors of nickel-based single crystal superalloy. *Comput Mater Sci*, 2015, 99: 348–360
- 48 Huang S, Huang M, Li Z. Effect of interfacial dislocation networks on the evolution of matrix dislocations in nickel-based superalloy. *Int J Plast*, 2018, 110: 1–18
- 49 Yang H, Li Z, Huang M. Modeling dislocation cutting the precipitate in nickel-based single crystal superalloy via the discrete dislocation dynamics with SISF dissociation scheme. *Comput Mater Sci*, 2013, 75: 52–59
- 50 Yang H, Li Z, Huang M. Modeling of abnormal mechanical properties of nickel-based single crystal superalloy by three-dimensional discrete dislocation dynamics. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2014, 22: 085009
- 51 Huang M, Li Z. The key role of dislocation dissociation in the plastic behaviour of single crystal nickel-based superalloy with low stacking fault energy: Three-dimensional discrete dislocation dynamics modelling. *J Mech Phys Solids*, 2013, 61: 2454–2472
- 52 Xiong J, Li Z H, Zhu Y X, et al. Microstructure evolution mechanism based crystal-plasticity constitutive model for nickel-based superalloy and its finite element simulation (in Chinese). *Chin J Theor App Mech*, 2017, 49: 763–781 [熊骏, 李振环, 朱亚新, 等. 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. *力学学报*, 2017, 49: 763–781]
- 53 Huang M, Li Z, Wang C. Discrete dislocation dynamics modelling of microvoid growth and its intrinsic mechanism in single crystals. *Acta Mater*, 2007, 55: 1387–1396
- 54 Liang S, Huang M, Li Z. Discrete dislocation modeling on interaction between type-I blunt crack and cylindrical void in single crystals. *Int J Solids Struct*, 2015, 56-57: 209–219
- 55 Liang S, Zhu Y, Huang M, et al. Studying dislocation-induced shielding effect on the crack-tip in polycrystal by discrete dislocation dynamics. *Int J Solids Struct*, 2019, 156-157: 148–162
- 56 Huang M, Li Z, Tong J. The influence of dislocation climb on the mechanical behavior of polycrystals and grain size effect at elevated temperature. *Int J Plast*, 2014, 61: 112–127
- 57 Hou C, Li Z, Huang M, et al. Discrete dislocation plasticity analysis of single crystalline thin beam under combined cyclic tension and bending. *Acta Mater*, 2008, 56: 1435–1446
- 58 Hou C, Li Z, Huang M, et al. Cyclic hardening behavior of polycrystals with penetrable grain boundaries: Two-dimensional discrete dislocation dynamics simulation. *Acta Mech Solid Sin*, 2009, 22: 295–306
- 59 Ouyang C, Huang M, Li Z, et al. Circular nano-indentation in particle-reinforced metal matrix composites: Simply uniformly distributed particles lead to complex nano-indentation response. *Comput Mater Sci*, 2010, 47: 940–950
- 60 Ouyang C, Li Z, Huang M, et al. Discrete dislocation analyses of circular nanoindentation and its size dependence in polycrystals. *Acta Mater*, 2008, 56: 2706–2717

Summary for “离散位错动力学算法及其在材料塑性行为模拟中的应用”

Discrete dislocation dynamics algorithms and their application in modeling of plastic behaviors of crystalline materials

Minsheng Huang^{1,2*}, Song Huang^{1,2}, Shuang Liang^{1,2} & Zhenhuan Li^{1,2}

¹ Department of Mechanics, Huazhong University of Science & Technology, Wuhan 430074, China;

² Hubei Key Laboratory of Engineering Structural Analysis and Safety Assessment, Huazhong University of Science & Technology, Wuhan 430074, China

* Corresponding author, E-mail: mshuang@hust.edu.cn

The plastic behaviors of crystalline materials are induced by the evolution of a series of dislocations. Discrete dislocation dynamics (DDD) can be used to model plastic deformation by taking into account the nucleation, annihilation, motion of dislocations, and formation of jogs, junctions, networks, and other dislocation structures directly. As a result, it can be used to investigate the physical correlation between material microstructures, dislocation structures, and plastic responses. It can also model the intrinsic size effect of plastic behaviors at the micron/submicron scales. Since its modeling scale is much larger than that of the microscopic molecular dynamics but is smaller than that of the macroscopic finite element method (FEM), DDD plays a connecting link role in multiscale modeling.

In the present manuscript, three categories of DDD schemes, i.e., the DDD-FEM superposition algorithm, the DDD-FEM direct coupling algorithm, and DDD-extended FEM (XFEM) coupling algorithm, are further developed and optimized. In the DDD-FEM superposition algorithm, the consideration of dislocation climb is specifically included to take into account the high-temperature effect. In the DDD-FEM direct coupling algorithm, the so-called virtual dislocations are introduced to distribute the Eigen plastic strain by dislocation evolution to the FEM module more appropriately, and a special scheme is developed to calculate the Peach-Koehler force on the dislocation efficiently. To model the problems with strong or weak interfaces (such as cracks, voids, particles, and grain boundaries), the scheme coupling the DDD and XFEM, which is not sensitive to the finite element mesh, is further developed carefully. Each of these three DDD schemes has its own special characteristics, and so they are suitable for solving different plastic problems.

Based on these three kinds of DDD algorithms, the plastic deformation mechanisms of nickel-based superalloy, the damage and fracture behaviors of crystalline materials, and the size effect and microstructure dependency of heterogeneous crystalline materials have been investigated systematically. For the nickel-based superalloy, the dislocation mechanisms for the hardening responses, the abnormal yielding behavior with increasing temperature, the loading rate effect, the lattice misfit effect, and the crystalline orientation effect and the dislocation climb effect have been studied in detail. Based on these dislocation mechanisms and the special two-phase material microstructures, a crystal plasticity constitutive law informed by dislocation and microstructure mechanisms suitable for single crystal nickel-based superalloy was here developed. Further, the microvoid growth mechanism, the crack tip-microvoid interaction, the crack tip ratchetting responses, the crack shielding effect by dislocation, and the effect of crack-tip dislocation emission on crack growth have also been investigated systematically through DDD simulations. In addition, the plastic behavior, its size effect, and intrinsic dislocation mechanisms for materials with heterogeneous structures, such as particle-enhanced metal matrix composites, multilayered metallic films, and polycrystalline materials, have also been studied carefully using DDD models, especially at elevated temperature. This type of DDD research has facilitated better understanding of the intrinsic mechanisms of hardening response, cyclic plasticity, fracture, damage evolution, size effect, and microstructure dependency. DDD can be further used to study the plastic behaviors of crystals under the extreme environmental conditions, such as high temperature, high pressure, high loading rate (shocking), chemical erosion environment, and high neutron irradiation. DDD has recently become a powerful model of the behavior of metallic materials at microscale in a more physical manner than existing plasticity models.

discrete dislocation dynamics, finite element method, extended finite element method, nickel-based superalloy, size effect, micro-structure dependency

doi: [10.1360/N972018-01291](https://doi.org/10.1360/N972018-01291)