DOI: 10.3901/JME.2020.04.065

NiTiNb 记忆合金热力学性能的试验 及其唯象本构模型*

陈翔^{1,2,3} 陈伟¹ 禄盛¹ 金晓清² 马文生³ 赵洋¹

(1. 重庆邮电大学先进制造工程学院 重庆 400065;

2. 重庆大学机械传动国家重点实验室 重庆 400044;

3. 重庆水泵厂有限责任公司 重庆 400000)

摘要: 现有形状记忆合金(Shape memory alloy, SMA)管接头数值分析中没有考虑塑性变形及其影响, 基于不可逆热力学框架, 考虑塑性变形对逆向马氏体相变的影响, 构建相变和塑性耦合的 NiTiNb SMA 唯象学本构模型, 基于有限元软件 ABAQUS 二次开发功能, 编译用户自定义子程序, 对 SMA 热机耦合作用过程进行数值模拟, 并与 NiTiNb 合金低温下的拉伸和约束升温性能试验研究结果对比。结果表明, 数值分析结果能够很好地描述试验所得的应力应变曲线和升温过程的应力温度曲线特征, 能够描述材料预变形提高逆向马氏体相变温度的规律, 得到低温变形及升温恢复过程中材料内部 Mises 应力、等效相变应变和等效塑性应变的演化规律。结果表明数值仿真与试验取得了较好的一致性, 为进一步的 SMA 管接头装配性能模拟及设计优化奠定基础。

关键词: 形状记忆合金(SMA); 塑性变形; 本构模型; 数值模拟

中图分类号: TG139

Thermodynamic Performance Test and Phenomenological Constitutive Model of NiTiNb Shape Memory Alloy

CHEN Xiang^{1,2,3} CHEN Wei¹ LU Sheng¹ JIN Xiaoqing² MA Wensheng³ ZHAO Yang¹

(1. School of Advanced Manufacturing Engineering,

Chongqing University of Posts and Telecommunications, Chongqing 400065;

2. State Key Laboratory of Mechanical Transmission, Chongqing University, Chongqing 400044;

3. Chongqing Water Pump Factory Co., Ltd., Chongqing 400000)

Abstract: Plastic deformation and its effects are not considered in the numerical analysis of existing shape memory alloy(SMA) pipe connection. Based on the irreversible thermodynamic framework, the influence of plastic deformation on the reverse martensitic transformation is considered and a phase transformation and plastically coupled NiTiNb SMA phenomenological constitutive model is constructed. Based on the finite element software ABAQUS and its secondary development function, the user-defined subroutine (UMAT) is compiled. The thermal-mechanical behavior of NiTiNb SMA is simulated and compared with the experimental results of tensile and constrained heating properties of NiTiNb SMA at low temperature. The results show that the numerical results can well describe the stress-strain curve obtained by the test and the stress-temperature curve characteristics of the heating process, which describe the law of material pre-deformation to improve the reverse martensitic transformation temperature. The evolution law of Mises stress, equivalent phase strain and equivalent plastic strain in the material during low temperature deformation and temperature recovery is obtained. The results show that the numerical simulation is in good agreement with the experiment, which lays a foundation for the further simulation and optimization of the assembly performance of SMA pipe joints.

Key words: shape memory alloy(SMA); plastic deformation; constitutive model; numerical simulation

* 国家自然科学基金(11802047, 51807019)、重庆市基础与前沿(cstc2016jcyjA0594, cstc2016jcyjA0443)和国家重点实验室开放基金(SKLMT-KFKT-201711, SV2018-KF-28)资助项目。20190318收到初稿, 20191029收到修改稿

0 前言

形状记忆合金(Shape memory alloy, SMA)因其存在的奥氏体(B2) $\leftrightarrow$ 马氏体(B19')固态相变而具有独特的超弹性(Superelasticity)和形状记忆效应(Shape memory effect),自 20 世纪 60 年代被发现以来,已广泛应用于航空、医疗、汽车以及机器人等多个领域^[1]。其中, NiTiNb SMA(主要是 Ni₄₇Ti₄₄Nb₉)的独特优势是具有宽的相变滞后特性和良好的塑性成形特性,用其制作的管接头可以在常温下储运和安装,在航空航天领域的液压管路和气体管路连接中得到广泛应用。

国内外学者对 SMA 本构模型开展了大量的研究,这些模型大致可以分为三类,即纳观尺度的微观本构模型、介观尺度的细观力学本构模型和宏观尺度的唯象学(现象学)本构模型。微观力学模型旨在描述 SMA 变形行为中的微结构特征,如相形核、界面运动、马氏体孪晶生长等,它们大多基于 Ginzburg-Landau 理论或分子动力学^[2-4]。微观力学模型能够揭示相变过程材料内部微结构的演化,但限于时间尺度和空间尺度的约束,应用于实际工程结构中难度较大。细观力学模型采用细观力学和宏观热力学相结合的方法构建材料本构关系^[5-8]。此类模型能很好地描述马氏体的重取向及退孪晶等过程,但引入的内变量较多降低了其计算效率,因此工程应用效率较低。

唯象学模型通常基于唯象热力学或试验数据拟合,采用宏观量来描述系统的状态。由于此类模型只描述材料的宏观力学响应,忽略材料内部热机载荷下的相互作用,计算速度快且易与有限元相结合,是目前工程应用最广泛、最成熟的一类本构模型。例如, ARGHAVANI 等^[9]以应力诱发马氏体相变作为内变量构建了多轴加载下的三维唯象学本构模型。LAGOUDAS 等^[10]建立了 NiTi 多晶唯象学本构模型及其算法,并应用于 SMA 弹簧的有限元分析。周博等^[11]利用 SMA 在相变过程中马氏体体积分数和相变自由能的微分关系,建立了 SMA 宏观力学模型。最近,李云飞等^[12]基于不可逆热力学理论框架并假定两个内变量分别表征合金变形过程中的相变与塑性行为,构建了 NiTi 合金的相变-塑性本构模型。

上述唯象学模型多针对 NiTi SMA 构建,由于 NiTiNb 合金成分及微观组成的复杂性,且其变形过程很容易引入 Nb 相的塑性变形,因此,构建其本

构模型时需要考虑塑性变形及其影响。陈斌^[13]将 NiTiNb 合金视为 NiTi 基体中镶嵌 Nb 相夹杂的混合物,采用 Mori-Tanaka 方法发展了细观力学本构模型。该模型合理地考虑了材料内部细观尺度的微结构特征及其相互作用,但模型计算量大,且需要对 Eshelby 张量进行各向同性化处理才能得到较为准确的计算结果,限制了模型的普适性。陈翔^[14]基于片层状假设,采用非经典内蕴时间弹塑性本构理论及 Hill 自洽方法构建了考虑塑性影响和材料微结构形式的跨层次 NiTiNb SMA 本构模型。该模型虽然能很好地描述试验现象,但鉴于本构模型的多参数特征及非经典内蕴时间本构理论苛刻的收敛性,无法有效地嵌入有限元应用分析中。此外,对于 NiTiNb SMA,其应用最广泛的是在管接头等密封连接领域。对于此类管接头,在扩径时由于变形的梯度效应,往往在内壁处产生较大的塑性变形,而以往的 SMA 管接头数值分析没有考虑塑性变形及其影响^[15-17]。试验表明,塑性变形除影响加载阶段的应力分布外,还将显著影响其逆向相变温度^[18-19]。鉴于此,为详细研究 NiTiNb 合金相变及塑性热力学性能的影响规律,有必要建立一种易于工程应用且考虑塑性变形影响的 NiTiNb SMA 唯象学模型。

本文首先对低温下 NiTiNb 合金的拉伸特性及升温恢复特性进行试验研究,获取材料热力学性能。基于不可逆热力学框架并考虑塑性变形对马氏体相变的影响,构建相变-塑性耦合的 SMA 本构模型。推导其增量算法并借助于有限元软件 ABAQUS 二次开发功能,编译用户自定义子程序 UMAT,对试验结果进行数值模拟。分析变形过程及升温恢复过程中试件内部 Mises 等效应力、等效相变应变和等效塑性应变的演化,验证模型和算法的实用性和可靠性,为后续进行考虑塑性的 SMA 管接头装配性能模拟及设计优化奠定基础。

1 试验

1.1 试验设备及过程

通常情况下, NiTiNb SMA 在 $M_s+30\text{ }^{\circ}\text{C}$ (M_s 为奥氏体转变为马氏体的起始温度)下预变形 16% 时可以显著提高其逆向相变滞后温度并保持较高恢复率^[20]。本文所用 NiTiNb 合金 $M_s=-90.37\text{ }^{\circ}\text{C}$ ^[21],因此试验温度设定在 $-60\text{ }^{\circ}\text{C}$ 。NiTiNb 管接头在扩孔时主要受到沿着环向的拉应力,其应力状态表现出类似单轴拉伸的特征。鉴于此,本文采用单轴拉伸试验确定 NiTiNb SMA 的材料参数。拉伸试验在

MTS-858 电液伺服低周疲劳拉扭材料试验机上进行, 其轴向载荷范围为 ± 15 kN, 扭转载荷范围为 ± 100 N·m, 试验温度由 GDW-50 高低温环境箱进行控制, 温度控制范围为 -70 °C 到 120 °C, 温箱工作过程中的温度波动在 ± 0.5 °C 以内, 温度均匀度达 ± 2 °C。试验机和温箱如图 1 中所示。

图 1 MTS 试验机及高低温系统

试件加工形状如图 2a 所示, 具体尺寸见图 2b (单位 mm)。试件与夹头采用螺纹连接, 为了避免产生相对滑动, 在两端夹头处各安装一个反向螺母, 螺母两端用砂纸磨平, 以防止产生非轴向的反向阻力, 影响单轴拉伸效果。应变测量采用 YYU-10/25 高低温电子引伸计, 试件安装后效果如图 2c 和图 2d 所示。试验过程中轴向载荷的控制方式采用位移控制, 为了保证准静态加载, 以降低加载过程中相变潜热对材料变形行为的影响, 加载速率控制为 $1.3 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, 温度改变速率控制在 2 °C/min 左右。

(a) 拉伸试件实物

(b) 试件具体尺寸/mm

(c) 试件装夹及引伸计安装

(d) 安装在温度箱内整体效果

图 2 试件尺寸及试验安装图

被连接管采用钢材, 加工成图 2b 所示形式, 试样在室温下(23 °C)进行单轴拉伸试验, 以确定其材料参数。

1.2 试验结果

本文试验过程如下: 试件安装完毕后保持无应力状态将环境温度降至 -60 °C, NiTiNb SMA 试件单轴拉伸至不同变形量(6%, 10%和 16%), 卸载到

应力为零后约束两端位移, 然后升温至 80 °C 以上。 -60 °C 下不同拉伸变形量的应力-应变曲线如图 3 所示。由图 3 可见, 三次试验结果的重合度较高, 初始阶段奥氏体发生弹性变形, 应力达到约 200 MPa 时发生应力诱发马氏体相变, 应力-应变曲线出现跌落和应力平台, 对于拉伸 6%应变的曲线卸载后残余约 5.1%的应变; 当应变达到约 8%时, 应力平台结束, 开始进入弹塑性强化阶段, 此时曲线斜率小于初始时弹性响应的斜率。卸载曲线不是线性卸载, 其原因可归结如下: ① 卸载过程发生少量的马氏体逆向相变或重取向变形; ② 金属材料的“包辛格效应”。拉伸 10%应变卸载后残余约 9%的应变, 拉伸 16%曲线卸载后残余约 13%的应变。

图 3 -60 °C 下拉伸不同变形量(6%, 10%和 16%)的应力-应变曲线

进一步, 对卸载后的试件进行约束升温, 测得的曲线如图 4 所示。初始时, 随着温度的升高, 轴向应力逐渐降低产生压缩应力, 这是由于材料受热膨胀而试件端部被夹持端约束, 因此产生压缩内应力。对于拉伸 6%卸载曲线, 当温度达到 -20 °C 左右时, 应力开始由降转升; 当温度接近 0 °C 时, 随着温度的升高, 应力逐渐升高, 材料内应力由压缩

图 4 -60 °C 下拉伸不同变形量(6%, 10%和 16%)卸载后约束升温的应力-温度曲线

转变为拉伸。其原因可以归结为材料热膨胀和逆向相变共同作用的结果：初始时无逆向相变发生，材料以热膨胀为主，产生压缩应力，曲线下降；随着温度的升高，当温度满足逆向相变条件时，发生逆向马氏体相变，低温拉伸时产生的变形开始恢复，试件缩短而产生拉伸应力，表现为应力-温度曲线开始上升。类似的规律也出现在拉伸 10% 和 16% 的曲线中，它们的不同之处是应力升高时对应的温度点不同，即随着预变形量的增加，开始恢复的逆向相变温度也逐渐增加。该试验结果表明预变形量对材料逆向相变温度具有显著影响。

图 5 所示为被连接管钢材常温下拉伸的应力-应变曲线，其曲线呈典型的弹塑性特征，其屈服应力约 420 MPa。

图 5 被连接管钢材常温拉伸应力应变曲线

2 本构模型

对于 NiTiNb SMA，其本构关系建立如下。

2.1 状态变量的选取

取温度 T 、总应变 ε 和一组内变量为状态变量，根据形状记忆合金的一般特性并考虑塑性变形的影响，将内变量分为两组，分别描述相变和塑性对应的耗散，包含相变应变 ε^t ，塑性应变 ε^p 、运动强化变量 α 和等向强化变量 p 。

2.2 自由能函数

假设存在一个热力学自由能势函数 Φ ，耗散材料的热力学状态可由温度 T ，应变张量 ε 及内变量 ε^t 、 ε^p 、 α 、 p 的一个完整集合唯一决定

$$\Phi(\varepsilon, \varepsilon^t, \varepsilon^p, \alpha, p, T) \quad (1)$$

通常情况下，自由能函数可以写成^[22]

$$\Phi(\varepsilon - \varepsilon^t - \varepsilon^p - \varepsilon^\theta, \varepsilon^t, \alpha, p, T) = \Phi(\varepsilon^e, \varepsilon^t, \alpha, p, T) \quad (2)$$

式中， $\varepsilon^e = \varepsilon - \varepsilon^t - \varepsilon^p - \varepsilon^\theta$ ， $\varepsilon^\theta = \theta(T - T_0)$ 为热膨胀应变， θ 为线性膨胀系数张量， T_0 为参考温度。将自由能函数 Φ 进一步分解为弹性、相变、塑性、温度及相变和塑性耦合对应的部分，即

$$\Phi(\varepsilon^e, \varepsilon^t, \alpha, p, T) = \Phi^e(\varepsilon^e, T) + \Phi^t(\varepsilon^t, T) + \Phi^p(\alpha, p, T) + \Phi^\theta(T) + \Phi^c(\varepsilon^t, p) \quad (3)$$

弹性

$$\Phi^e(\varepsilon^e, T) = \frac{1}{2\rho} \varepsilon^e : \mathbf{C}(T) : \varepsilon^e \quad (4)$$

相变

$$\Phi^t(\varepsilon^t, T) = \frac{1}{3\rho} C^t \varepsilon^t : \varepsilon^t + \frac{1}{\rho} \tau_M(T) \|\varepsilon^t\| + \frac{1}{\rho} \Gamma(\varepsilon^t) \quad (5)$$

塑性

$$\Phi^p(\alpha, p, T) = \frac{1}{3\rho} C^p(T) \alpha : \alpha + \frac{1}{\rho} Y(p) \quad (6)$$

温度

$$\Phi^\theta(T) = c_v \left[(T - T_0) - T \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) \right] \quad (7)$$

相变和塑性耦合

$$\Phi^c(\varepsilon^t, p) = -\frac{1}{\rho} Q(p) \|\varepsilon^t\| \quad (8)$$

式中， $\mathbf{C}$ 为弹性刚度张量， C^p 和 C^t 为材料常数，它们均为温度相关量。本文为简化计，不考虑其随温度的变化。 ρ 和 c_v 分别是材料的密度和比热，假设其在相变过程中保持不变。 $\|\bullet\|$ 表示任意二阶张量“ $\bullet$ ”的欧几里得范数。在函数 $\Phi^t(\varepsilon^t, T)$ 表达式中 $\tau_M(T)$ 的定义为

$$\tau_M(T) = \begin{cases} B(T - M_0) & T > M_0 \\ 0 & T \leq M_0 \end{cases} \quad (9)$$

式中，参数 B 表示相变的临界应力随温度变化的比例系数， M_0 为参考温度^[23]。 $\Gamma(\varepsilon^t)$ 和 ε^t 受如下约束

$$\gamma \geq 0 \quad \|\varepsilon^t\| - \varepsilon_L \leq 0 \quad \Gamma(\varepsilon^t) = \gamma (\|\varepsilon^t\| - \varepsilon_L) = 0 \quad (10)$$

这表示相变应变存在最大值， γ 为拉格朗日乘子， ε_L 表示相变达到饱和时的最大相变应变值。与此类似的约束函数也被 SOUZA 等^[23]和 FRÉMOND 等^[24]用于描述饱和相变， $Y(p)$ 和 $Q(p)$ 在随后的表述中定义。对 $\Phi(\varepsilon^e, \varepsilon^t, \alpha, p, T)$ 全微分可得

$$\dot{\Phi} = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon^e} : \dot{\varepsilon}^e + \frac{\partial \Phi}{\partial T} \dot{T} + \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon^t} : \dot{\varepsilon}^t + \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} : \dot{\alpha} + \frac{\partial \Phi}{\partial p} \dot{p} \quad (11)$$

由 Clausius-Duhem 不等式

$$\sigma : \dot{\varepsilon} - \rho (\dot{\Phi} + \eta \dot{T}) \geq 0 \quad (12)$$

可得

$$\begin{aligned} \sigma : \dot{\varepsilon} - \rho(\dot{\Phi} + \eta \dot{T}) &= \left(\sigma - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon^e} \right) \dot{\varepsilon}^e + \rho \left(-\eta - \frac{\partial \Phi}{\partial T} \right) \dot{T} + \\ \sigma : \dot{\varepsilon}' + \sigma : \dot{\varepsilon}^p + \sigma : \dot{\varepsilon}^\theta - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon'} : \dot{\varepsilon}' - \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} : \dot{\alpha} - \frac{\partial \Phi}{\partial p} \dot{p} &\geq 0 \end{aligned} \quad (13)$$

对于任意的 ε^e , Clausius-Duhem 不等式均成立, 即

$$\sigma = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon^e} = C : (\varepsilon - \varepsilon' - \varepsilon^p - \varepsilon^\theta) \quad (14)$$

同样, Clausius-Duhem 不等式对于任意温度 T 均成立, 从而可得熵的表达式

$$\eta = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} + \frac{1}{\rho} \sigma : \theta = c_v \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) - \frac{1}{\rho} B \|\varepsilon'\| + \frac{1}{\rho} \sigma : \theta \quad (15)$$

式中, σ 和 η 分别为应力和熵。从式(13)可定义相变背应力 χ' 与塑性背应力 χ^p 如下

$$\chi' = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon'} = \frac{2}{3} C' \varepsilon' + (\tau_M(T) - Q(p) + \gamma) N^{\varepsilon'} \quad (16)$$

$$\chi^p = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial \alpha} = \frac{2}{3} C^p \alpha \quad (17)$$

并定义 ε' 方向

$$N^{\varepsilon'} = \varepsilon' / \|\varepsilon'\| \quad (18)$$

注意到 $\varepsilon' = 0$ 时 $\|\varepsilon'\| = 0$, 上方程为奇异的。通常用规则化应变 $\|\varepsilon'\| = \sqrt{\|\varepsilon'\|^2 + \delta} - \sqrt{\delta}$ 克服此奇异性^[25], 其中 δ 是用户定义的一个正的小量, 通常取 $\delta = 1 \times 10^{-8}$ 。

函数 $Q(p)$ 通过背应力间接影响相变发生的条件, 根据 PIAO 等^[18]的试验结果, 本文定义 $Q(p) = Q_0 [1 - \exp(-\xi p)]$ 以描述塑性变形与其引起的 A_s 提高间的关系, 式中 Q_0 和 ξ 分别为材料参数。BO 和 LAGODAS^[26]用类似的函数描述随着塑性变形的增加, 总位错对相变的影响趋于饱和值的现象。应说明的是, 仅考虑了塑性变形对相变背应力的影响, 对于一般形状记忆合金这一假设已能很好地描述试验现象。

从式(13)还可定义塑性部分的曳应力

$$\begin{aligned} R = \rho \frac{\partial \Phi}{\partial p} &= Y'(p) - Q'(p) \|\varepsilon'\| = \\ R_0 (1 - \exp(-\zeta p)) - Y_0 \exp(-\xi p) \|\varepsilon'\| &\quad (19) \end{aligned}$$

式中, R_0 、 ζ 和 Y_0 为材料常数。在塑性理论中, 式(19)右边的第一项常用于描述屈服面等向强化^[22], 式(19)右边的第二项用于考虑相变对塑性的影响。

将式(14)~(17)代入式(13)可得

$$\sigma : \dot{\varepsilon}' + \sigma : \dot{\varepsilon}^p - \chi' : \dot{\varepsilon}' - \chi^p : \dot{\alpha} - R \dot{p} \geq 0 \quad (20)$$

内变量 ε' , ε^p , α 和 p 的演化通常耗散势函数方法

确定^[22], 即

$$\varphi = \sigma : \dot{\varepsilon}' + \sigma : \dot{\varepsilon}^p - \chi' : \dot{\varepsilon}' - \chi^p : \dot{\alpha} - R \dot{p} \quad (21)$$

利用 Legendre-Fenchel 变换可得到应力空间的耗散势函数 $\Psi(\sigma, \chi', \chi^p, R, T)$ 。定义耗散势函数

$$\Psi^t(\sigma, \chi', T) = f^t(\sigma, \chi', T) \quad (22)$$

$$\Psi^p(\sigma, \chi^p, R, T) = f^p(\sigma, \chi^p, R, T) + \frac{3}{4} \frac{a}{C^p} \chi^p : \chi^p \quad (23)$$

分别用于获得相变和塑性内变量的演化, 其中 a 为材料常数, $f^t(\sigma, \chi', T)$ 和 $f^p(\sigma, \chi^p, R, T)$ 分别为相变和塑性的屈服函数, 定义为

$$f^t(\sigma, \chi', T) = J_2(\sigma' - \chi') - \sigma_s' \quad (24)$$

$$f^p(\sigma, \chi^p, R, T) = J_2(\sigma' - \chi^p) - R - \sigma_s^p \quad (25)$$

式中, σ_s' 和 σ_s^p 分别为相变和塑性的屈服应力, 函数 J_2 的定义为

$$J_2(\beta) = \sqrt{\frac{3}{2} \beta : \beta} \quad (26)$$

式中, β 为任意二阶张量, 故可得内变量 ε' 、 ε^p 、 α 和 p 的演化方程如下

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}' &= -\dot{\lambda}' \frac{\partial \Psi^t}{\partial \chi'} = \dot{\lambda}' \frac{\partial \Psi^t}{\partial \sigma} = \frac{3}{2} \frac{\sigma' - \chi'}{J_2(\sigma' - \chi')} \dot{\lambda}' = \\ N^t(\sigma, \chi') \dot{\lambda}' &\quad (27) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\varepsilon}^p &= \dot{\lambda}^p \frac{\partial \Psi^p}{\partial \sigma} = \frac{3}{2} \frac{\sigma' - \chi^p}{J_2(\sigma' - \chi^p)} \dot{\lambda}^p = \\ N^p(\sigma, \chi^p) \dot{\lambda}^p &\quad (28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{\alpha} &= -\dot{\lambda}^p \frac{\partial \Psi^p}{\partial \chi^p} = \frac{3}{2} \frac{\sigma' - \chi^p}{J_2(\sigma' - \chi^p)} \dot{\lambda}^p - \frac{3}{2} \frac{a}{C^p} \chi^p \dot{\lambda}^p = \\ H^p(\sigma, \chi^p) \dot{\lambda}^p &\quad (29) \end{aligned}$$

$$\dot{p} = -\dot{\lambda}^p \frac{\partial \Psi^p}{\partial R} = \dot{\lambda}^p \quad (30)$$

式中, $\dot{\lambda}^p = \sqrt{(2/3) \varepsilon^p : \dot{\varepsilon}^p}$, $\dot{\lambda}' = \sqrt{(2/3) \varepsilon' : \dot{\varepsilon}'}$ 。

利用以上结果可以证明, 如果以下条件得到满足:

① 当 $f^t = 0$, $f^p = 0$ 时, Ψ^t 和 Ψ^p 为凸函数; ② 当 $f^t = 0$, $f^p = 0$ 时, $\Psi^t(0, 0, T) = 0$ 且 $\Psi^p(0, 0, 0, T) = 0$ 。则式(31)成立

$$\begin{aligned} \dot{\lambda}' \left(\frac{\partial \Psi^t}{\partial \sigma} : \sigma + \frac{\partial \Psi^t}{\partial \chi'} : \chi' \right) + \\ \dot{\lambda}^p \left(\frac{\partial \Psi^p}{\partial \sigma} : \sigma + \frac{\partial \Psi^p}{\partial \chi^p} : \chi^p + \frac{\partial \Psi^p}{\partial R} R \right) \geq 0 \end{aligned} \quad (31)$$

显然, 所定义的屈服函数及耗散势函数均满足上述两个条件。如果 ε' 、 ε^p 、 α 和 p 的演化如式

(27)~(30)所定义, 则不等式(31)成立。根据相变和塑性屈服函数及拉格朗日约束函数, 则材料可能存在如下六种状态: 弹性、纯相变、饱和相变、弹性+塑性、纯相变+塑性以及饱和相变+塑性。

3 算法及程序流程

上述本构模型通过用户自定义子程序(UMAT)导入到 ABAQUS 材料库中进行数值分析。因此, 首先应获得增量形式的材料本构方程组。假设在时刻 t_n 第 n 步增量加载已经完成, 且 ε_n^e , ε_n^t , ε_n^p , α_n , p_n 和 γ_n , 屈服函数 $f^t(\sigma, \chi^t, T)$ 和 $f^p(\sigma, \chi^p, R, T)$, 运动强化函数 $H^p(\sigma, \chi^p)$, 流动方向 $N^t(\sigma, \chi^t)$, $N^p(\sigma, \chi^p)$ 均已得到。

在此基础上, 给定 $n+1$ 步温度增量 ΔT_{n+1} 和应变增量 $\Delta \varepsilon_{n+1}$, 则 ε_{n+1}^e , ε_{n+1}^t , ε_{n+1}^p , α_{n+1} , p_{n+1} 和 γ_{n+1} 在时刻 t_{n+1} 的值可以联立以下方程和式(16)和式(17)求解得到。

$$\varepsilon_{n+1}^e = \varepsilon_{n+1}^{e, trial} - \Delta \lambda^t N^t(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^t) - \Delta \lambda^p N^p(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^p) \quad (32)$$

$$\varepsilon_{n+1}^t = \varepsilon_n^t + \Delta \lambda^t N^t(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^t) \quad (33)$$

$$\varepsilon_{n+1}^p = \varepsilon_n^p + \Delta \lambda^p N^p(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^p) \quad (34)$$

$$\alpha_{n+1}^p = \alpha_n^p + \Delta \lambda^p N^p(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^p) \quad (35)$$

式中, $\varepsilon_{n+1}^{e, trial} = \varepsilon_n^e + \Delta \varepsilon$ 。

方程组需要满足如下的约束

$$\begin{aligned} \Delta \lambda^t &\geq 0, \Delta \lambda^t f^t(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^t, T) = 0 \\ f^t(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^t, T) &\leq 0 \end{aligned} \quad (36)$$

$$\begin{aligned} \Delta \lambda^p &\geq 0, f^p(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^p, R_{n+1}, T) \leq 0 \\ \Delta \lambda^p f^p(\sigma_{n+1}, \chi_{n+1}^p, R_{n+1}, T) &= 0 \end{aligned} \quad (37)$$

$$\gamma \geq 0 \quad \|\varepsilon_{n+1}^t\| - \varepsilon_L \leq 0 \quad \gamma (\|\varepsilon_{n+1}^t\| - \varepsilon_L) = 0 \quad (38)$$

上述方程组采用图形返回算法进行求解, 求解过程由弹性预测和非弹性修正两部分组成。具体的程序计算流程如图 6 所示, 首先由弹性刚度矩阵计算试探应力, 由式(36)和式(37)确定是否发生相变和塑性变形, 若没有相变和塑性发生, 则以弹性试探应力更新本增量步的应力, 以弹性刚度阵作为材料积分点的 Jacobian 矩阵; 若发生相变和塑性变形, 则进行迭代求解上述非线性方程组(式(16)、(17), (32)~(38))进行非弹性修正, 计算材料积分点的 Jacobian 矩阵并更新本增量步的应力增量及各内变量。

图 6 用户自定义子程序算法流程图

4 模型及材料参数

图 7a 是 NiTiNb SMA 试件的有限元模型尺寸示意图, 具体尺寸如表 1 所示。划分的有限元网格如图 7b 所示, 采用六面体实体单元(C3D8)。

(a) 有限元建模尺寸示意图

(b) 有限元模型网格划分

图 7 试件的有限元建模尺寸示意图及网格划分

表 1 有限元模型参数表

模型总长度	标距段宽度	模型厚度	倒圆角半径	端部宽度	夹具长度	标距段长度
L	W	T	R	A	B	C
140	20	10	10	30	12	100

NiTiNb 合金材料参数如表 2 所示, 被连接管钢材的材料参数如表 3 所示, 确定有限元模型和材料参数后对前文的试验过程进行模拟, 即先降温到 -60°C , 然后拉伸不同应变, 卸载后进行约束升温。整个模拟过程输出试件的应力-应变-温度曲线,

并对标距段内的 Mises 应力, 等效相变应变、等效塑性应变等变量进行分析, 以确定模型的有效性。

表 2 NiTiNb SMA 材料参数表

NiTiNb 相变转换温度							
$M_f/^{\circ}\text{C}$		$M_s/^{\circ}\text{C}$		$A_s/^{\circ}\text{C}$		$A_f/^{\circ}\text{C}$	
-130.89		-90.37		-68.29		-15.75	
管接头的材料参数							
E/GPa	ν	$B(\text{MPa}/^{\circ}\text{C})$	$M_0/^{\circ}\text{C}$	C'/MPa	C''/GPa	ξ	ζ
45 000	0.3	4	-60	300	1	80	15
Y_0/MPa	R_0/MPa	Q_0/MPa	σ_s'/MPa	σ_s''/MPa	Q_1/MPa	ε_L	$\theta(1/^{\circ}\text{C})$
0	550	120	180	220	300	0.1	10^{-3}

表 3 被连接管材料参数表

材料	E/GPa	σ_s/MPa	σ_b/MPa	$\alpha(1/^\circ\text{C})$	ν
钢	205	417	720	1.2×10^{-5}	0.28

5 计算结果及讨论

图 8 为有限元模拟-60 °C 下拉伸 16% 的应力-应变曲线与试验结果的对比, 为了更加详细分析拉伸过程中相变和塑性的演化规律, 选取拉伸过程的特征点(A~G), 标距段内与特征点对应的 Mises 等效应力、等效相变应变和等效塑性应变的变化如图 9 所示。

图 8 拉伸 16% 试验结果与数值模拟结果对比

图 9 拉伸过程不同特征点对应的 Mises 应力, 等效相变应变和等效塑性应变

对比图 8 和图 9 可得, 加载初始阶段(O~A), 应力应变曲线呈线弹性, 材料发生奥氏体弹性变形, A 点对应的等效相变应变量和塑性应变接近于 0; 过 A 点后发生马氏体相变, 比较 A、B 点(图 9)可见, 其 Mises 等效应力和等效塑性应变几乎保持不变, 应力应变曲线进入平台阶段, 其等效相变应变开始显著增加; 加载到 C 点时, 应力应变曲线的平台结束, 标距段内等效相变应变达到临界值, 开始进入弹塑性强化阶段; 继续加载到 D 点时, 应力应变曲线呈非线性弹塑性强化特征, 比较 C 点和 D 点可见(图 9), 标距段内 Mises 应力显著增加, 等效相变应变保持不变, 等效塑性应变显著增加; 达到加载末端 E 点时, 标距段内 Mises 应力、相变应变和塑性应变都达到最大值。此后开始卸载, 卸载过程(E~F~G)Mises 应力逐渐降低, 等效塑性应变保持不变, 由于此时温度未达到逆向相变的热力学临界条件, 卸载过程中无逆向马氏体相变发生, 等效相变应变保持不变。

进一步, 对拉伸 16% 并卸载后的试件进行约束升温, 升温过程的应力-温度关系曲线如图 10 所示。选取升温过程应力应变曲线中的特征点(H~L), 将特征点对应的 Mises 等效应力、等效相变应变和等效塑性应变随温度的演化关系提取, 如图 11 所示。综合分析图 10 和图 11 可得, 在升温的初始阶段(H 点), Mises 等效应力、等效相变应变和等效塑性应变保持为低温卸载后的水平; 升温到 I 点(-3 °C), 虽然此时温度已经高于马氏体逆向相变起始温度 A_s (-68.29 °C), 由于塑性变形的作用, 标距段内的等效相变应变仍保持不变, 表明尚未发生逆向马氏体相变。继续升温至 J 点, 应力-温度曲线出现转折, 由压缩应力向拉伸应力转变; 从 J 点到 L 点, Mises 等效应力迅速增加, 等效相变应变减少, 表明逆向马氏体相变发生, 此过程中等效塑性应变保持不变。

图 10 约束升温过程应力-温度关系对比(试验和数值模拟)

图 11 约束升温过程对应状态点的 Mises 应力, 等效相变应变和等效塑性应变

上述低温加卸载及约束升温恢复过程表明, 本文发展的考虑塑性影响的 SMA 唯象学本构模型能够很好的模拟 NiTiNb SMA 热力学行为, 并再现不同热力学加载阶段材料内部的 Mises 等效应力、等效相变应变和等效塑性变形的演化规律。进一步, 利用此模型对不同变形量(6%, 10%, 16%)热力学加载过程进行有限元分析, 数值仿真结果如图 12 和图 13 所示, 并与试验结果进行对比。

图 12 不同变形量拉伸有限元模拟曲线与试验曲线对比图

由图 12 可见, 有限元模型可以很好地模拟材料的弹性变形和应力平台以及相变结束后的弹塑性强硬化现象。但是由于本文的唯象学模型没有考虑马氏体形核瞬时引发的材料局部失稳与软化现象^[27], 因此无法描述相变初始的应力跌落现象; 对于塑性变形阶段, 有限元模拟结果 Mises 应力略偏大于试验结果。前面已经说明, 本文定义的屈服函数为凸函

图 13 约束升温恢复过程应力-温度数值模拟曲线与试验曲线对比图

数, 因此, 进入塑性变形阶段后数值模拟结果较试验结果外凸。卸载后试验测得的残余应变小于数值模拟的结果, 是由于本文发展的唯象学模型没有考虑卸载过程材料性能的局部演化特征, 如局部逆向相变和重取向, 因此相较试验结果呈现较强的线弹性。总体来讲, 对于 SMA 管接头的工程应用, 上述不足之处对其服役性能的影响较小, 在关心的热力学性能响应中, 本文模型与试验结果取得了较好的一致性, 能够满足形状记忆合金管接头装配的工程应用要求。

不同拉伸变形(6%, 10%和 16%)卸载后的升温恢复应力-温度曲线如图 13 所示。由图可见, 本文模型能够模拟试件在升温过程中应力先随着温度的升高而降低, 后随着温度的升高而升高的规律, 且应力温度的变化速率与试验一致。随着预变形量的增加, 升温时逆向相变的临界温度逐渐升高。值得注意的是, 本文模型在发生较为明显的塑性变形时与试验结果较为一致, 而在预应变为 6%时, 由于变形量未达到相变应变的临界值, 因此数值模型中塑性变形量趋近于 0, 逆向相变的温度接近未变形前的温度。而试验中由于试件拉伸过程存在变形局部效应(LÜDERS 带)以及相变诱发塑性变形等, 导致其产生了局部塑性应变, 从而提高其逆向相变温度。尽管如此, 由于 NiTiNb SMA 管接头在工程应用中往往引入大量的塑性变形, 因此, 本文模型能够对管接头装配性能进行有效的模拟。

由于管接头装配模拟过程涉及到与被连接管的连接, 因此还需要对被连接管钢材的性能进行数值仿真, 所得的应力应变曲线如图 14 所示, 并与前述被连接管钢材的拉伸试验结果进行对比, 可见运用 ABAQUS 自带的弹塑性本构模型并采用表 3 中的参数能够很好地模拟被连接管钢材的响应特征, 在弹性阶段和塑性阶段都与试验结果吻合较好。

图 14 被连接管钢材常温拉伸应力应变曲线对比
(数值仿真和试验)

本文进一步对 NiTiNb SMA 和被连接管钢材的数值模拟结果开展了网格无关性验证, 计算结果如图 15 和图 16 所示。对于 SMA 有限元模型, 分别采用 4 200、13 020 和 19 320 个单元, 所得的应力应变曲线基本重合, 网格数量对其计算结果无明显的影响。类似的, 对于钢材拉伸有限元结果, 分别采用 1 700、4 000、8 000 和 18 600 个单元, 所得的

图 15 SMA 拉伸 16% 数值仿真结果(不同网格数对比)

图 16 钢材拉伸数值仿真结果(不同网格数对比)

应力应变曲线几乎重合。上述结果表明本文建立的考虑塑性和相变耦合效应的 SMA 本构模型及其算法具有较高的可靠性, 为后续 SMA 管接头装配性能的精细模拟和系统分析模拟奠定坚实基础。

6 结论

通过 NiTiNb SMA 低温拉伸和升温恢复过程的试验研究, 获取了材料热机耦合作用下的响应特征, 构建了考虑塑性影响的相变-塑性耦合 NiTiNb SMA 唯象学本构模型并应用于有限元分析, 数值模拟与试验取得了较好的一致性, 验证了模型和算法有效性。具体结论如下。

(1) 试验结果表明, 低温加载时材料经历弹性变形, 相变应力平台和弹塑性强化三个阶段, 卸载时应力应变曲线呈一定的非线性。约束升温时, 试件内部先产生压缩应力, 发生逆向相变后压缩应力开始转变为拉伸应力, 且随着低温预变形量的增加, 应力转变点的温度升高, 表明塑性变形提高了马氏体逆向相变的温度。

(2) 对 SMA 低温拉伸及约束升温过程进行数值模拟并与试验结果进行对比, 结果表明本文构建的考虑塑性影响的本构模型能够很好地模拟材料在低温下的应力应变曲线和升温过程的应力温度曲线, 能够描述材料预变形提高逆向马氏体相变温度的规律。

(3) 数值仿真结果表明模型能够合理描述在加载的弹性阶段、相变平台阶段和弹塑性强化阶段, 卸载阶段及随后的约束升温等不同阶段材料内部 Mises 等效应力, 等效相变应变和等效塑性应变的演化规律。模拟结果与试验结果取得了很好的一致性。

参 考 文 献

- [1] MOHD J J, LEARY M, SUBIC A, et al. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities[J]. Materials & Design, 2014, 56(4): 1078-1113.
- [2] CHEN Xiang, LIU Teng, LI Rui, et al. Molecular dynamics simulation on the shape memory effect and superelasticity in NiTi shape memory alloy[J]. Computational Materials Science, 2018, 146: 61-69.
- [3] UEHARA T, ASAI C, OHNO N. Molecular dynamics simulation of shape memory behaviour using a multi-grain model[J]. Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering, 2009, 17(3): 035011.
- [4] KO W S, MAISEL S B, GRABOWSKI B, et al. Atomic scale processes of phase transformations in nanocrystalline

- NiTi shape-memory alloys[J]. *Acta Materialia*, 2017, 123: 90-101.
- [5] PIOTROWSKI B, ZINEB T B, PATOOR E, et al. Modeling of niobium precipitates effect on the Ni47Ti44Nb9 shape memory alloy behavior[J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 36(1): 130-147.
- [6] GALL K, SEHITOGLU H. The role of texture in tension-compression asymmetry in polycrystalline NiTi[J]. *International Journal of Plasticity*, 1999, 15(1): 69-92.
- [7] 朱伟国, 张杨, 赵聃. 多晶 NiTi 形状记忆合金相变的细观力学本构模型[J]. *金属学报*, 2013, 49(1): 123-128. ZHU Yiguo, ZHANG Yang, ZHAO Dan. Micromechanical constitutive model for phase transformation of NiTi polycrystal SMA[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2013, 49(1): 123-128.
- [8] 周博, 王振清, 梁文彦. 形状记忆合金的细观力学本构模型[J]. *金属学报*, 2006, 42(9): 919-924. ZHOU Bo, WANG Zhenqing, LIANG Wenyan. A micromechanical constitutive model of shape memory alloys[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2006, 42(9): 919-924.
- [9] ARGHAVANI J, AURICCHIO F, NAGHDABADI R, et al. A 3-D phenomenological constitutive model for shape memory alloys under multiaxial loadings[J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(7): 976-991.
- [10] LAGOUDAS D, HARTL D, CHEMISKY Y, et al. Constitutive model for the numerical analysis of phase transformation in polycrystalline shape memory alloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 32-33: 155-183.
- [11] 周博, 刘彦菊, 冷劲松, 等. 形状记忆合金的宏观力学本构模型[J]. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2009(7): 998-1006. ZHOU Bo, LIU Yanju, LENG Jinsong, et al. Macro-mechanical constitutive model of shape memory alloys[J]. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, 2009(7): 998-1006.
- [12] 李云飞, 陈成, 曾祥国. NiTi 合金的相变-塑性统一本构模型与数值算法[J]. *航空材料学报*, 2018, 38(1): 26-32. LI Yunfei, CHEN Cheng, ZENG Xiangguo. Unified constitutive model and numerical implementation of niti alloy involving phase transformation and plasticity[J]. *Journal of Aeronautical Materials*, 2018, 38(1): 26-32.
- [13] 陈斌. 镍钛铌形状记忆合金宏观细观力学行为研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2013. CHEN Bin. Research of micro and macro mechanical behavior of NiTiNb shape memory alloy[D]. Chongqing: Chongqing University, 2013.
- [14] 陈翔. 镍钛铌形状记忆合金特性的试验与本构模型研究[D]. 重庆: 重庆大学, 2015. CHEN Xiang. Experimental investigation and constitutive modeling for thermal-mechanical properties of NiTiNb SMA[D]. Chongqing: Chongqing University, 2015.
- [15] 康泽天, 周博, 薛世峰. 形状记忆合金管接头热机耦合行为的有限元数值模拟[J]. *机械工程学报*, 2018, 54(18): 68-75. KANG Zetian, ZHOU Bo, XUE Shifeng. Finite element numerical simulation on thermo-mechanical coupling behavior in shape memory alloy pipe connection[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2018, 54(18): 68-75.
- [16] 陈强, 王克鲁, 鲁世强, 等. $\Phi 10\text{mm}$ NiTiNb 形状记忆合金管接头数值模拟分析[J]. *热加工工艺*, 2017, 46(2): 74-77. CHEN Qiang, WANG Kelu, LU Shiqiang, et al. Numerical simulation and analysis of $\Phi 10\text{mm}$ NiTiNb shape memory alloy tube joints[J]. *Hot Working Technology*, 2017, 46(2): 74-77.
- [17] 徐祥, 阚前华, 康国政. 镍钛形状记忆合金管接头有限元分析[J]. *四川理工学院学报: 自然科学版*, 2016, 29(4): 26-30. XU Xiang, KAN Qianhua, KANG Guozheng. Finite analysis of nickel-titanium shape memory alloy pipe joints[J]. *Journal of Sichuan University of Science & Engineering(Natural Science Edition)*, 2016, 29(4): 26-30.
- [18] PIAO M, OTSUKA K, MIYAZAKI S, et al. Mechanism of the as temperature increase by pre-deformation in thermoelastic alloys[J]. *Materials Transactions, JIM*, 1993, 34(10): 919-929.
- [19] PIAO M, MIYAZAKI S, OTSUKA K. Characteristics of deformation and transformation in Ti44Ni47Nb9 shape memory alloy[J]. *Materials Transactions, JIM*, 1992, 33(4): 346-353.
- [20] ZHANG Chunsheng, ZHAO Liancheng, DUERIG T W, et al. Effects of deformation on the transformation hysteresis and shape memory effect in a Ni47Ti44Nb9 alloy[J]. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1990, 24(9): 1807-1812.
- [21] CHEN Xiang, PENG Xianghe, CHEN Bin, et al. Experimental investigation on transformation, reorientation and plasticity of Ni47Ti44Nb9 SMA under biaxial thermal-mechanical loading[J]. *Smart Materials and Structures*, 2015, 24(7): 1-12.
- [22] LEMAITRE J, CHABOCHE J L. Mechanics of Solid Materials[J]. *Journal of Engineering Mechanics*, 1992, 119(3): 642-643.
- [23] SOUZA A C, MAMIYA E N, ZOUAIN N. Three-dimensional model for solids undergoing stress-induced phase transformations[J]. *European Journal of Mechanics, A/Solids*, 1998, 17(5): 789-806.
- [24] FRÉMOND M, MIYAZAKI S. Shape memory alloys[M].

- Udine: Springer, Vienna Press, 1996.
- [25] AURICCHIO F, CONTI M, MORGANTI S, et al. Shape memory alloy: from constitutive modeling to finite element analysis of stent deployment[J]. *Computer Modeling in Engineering & Sciences*, 2010, 57(3): 225-244.
- [26] BO Zhonghe, LAGOUDAS D C. Thermomechanical modeling of polycrystalline SMAs under cyclic loading, Part III: evolution of plastic strains and two-way shape memory effect[J]. *International Journal of Engineering Science*, 1999, 37(9): 1175-1203.
- [27] 杜泓飞, 曾攀, 赵加清, 等. NiTi 合金中马氏体相变失稳与局部化的原位多场研究[J]. *金属学报*, 2013, 49(1): 17-25.
- DU Hongfei, ZENG Pan, ZHAO Jiaqing, et al. In situ multi-fields investigation on instability and transformation localization of martensitic phase transformation in NiTi alloys[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2013, 49(1): 17-25.
-
- 作者简介: 陈翔, 男, 1987 年出生, 博士, 副教授, 硕士研究生导师, 重庆机电集团博士后。主要研究方向为智能材料和结构热-机械性能的试验和数值模拟, 先进涂层材料微观性能计算。
E-mail: chenxiang@cqupt.edu.cn
- 赵洋(通信作者), 男, 1988 年出生, 博士, 副教授, 硕士研究生导师, 重庆机电集团博士后。主要研究方向为大型燃气轮机结构强度和振动性能的数值仿真及试验。
E-mail: zhaoyang@cqupt.edu.cn