

V. M. KINDRACHUK

Federal Institute for Materials Research and Testing, Berlin, Germany

AN IMPROVED TECHNIQUE FOR THE INTEGRATION OF CONSTITUTIVE RELATIONS FOR SINGLE-CRYSTAL PLASTICITY

Turbine blades in aero engines experience complex thermo-mechanical loadings, including creep, relaxation and cyclic straining. With respect to single-crystal superalloys, the dependence on the orientation becomes also crucial. Hence, the integration of the constitutive models to simulate the mechanical response of blades needs the robust numerical algorithms.

The constitutive relations for the single-crystal plasticity include a set of inequalities attributed to the Kuhn-Tucker conditions. Since the active constraints are a priori unknown, the conventional solution strategy follows a slip update procedure. The active slip systems which satisfy the constraints are thus iteratively determined. This is rather computationally expensive. Moreover, the convergence of the slip update procedure is an open issue. The paper addresses the topic of a stress-update algorithm which avoids the mentioned iterative search for the active constraints. To this purpose, the mathematical theory for replacement of inequalities by equations is applied. The constitutive relations are reformulated to the problems which omit inequalities with respect to new unknowns. These are uniquely related with the unknowns of the original problem.

The computational efficiency of the approach is demonstrated by the implicit integration of a crystallographic constitutive model for face-centered cubic (fcc) single-crystals. The shear strain rates on twelve octahedral and six cubic slip systems contribute to the resulting inelastic strain. For a more general consideration, the rate-dependent slip is assumed in addition to rate-independent plasticity. As a consequence, the deformation at both moderate and high service temperatures can be reproduced.

Keywords: *constitutive relations, single-crystal plasticity, integration evolution equations, slip update procedure.*

Introduction. Computation of mechanical response of a single-crystal, as a special case of multi-surface plasticity, is accompanied with two numerical difficulties. The first one is the problem of redundant constraints [1], which results in a non-unique solution of the constitutive relations. The second problem is that the constitutive relations for plasticity include inequalities, also known as Kuhn-Tucker conditions [2]:

$$f_g = 0, \dot{\lambda}_g^p \geq 0, \quad (1)$$

and

$$f_g \leq 0, \dot{\lambda}_g^p = 0, \quad (2)$$

where $\dot{\lambda}_g^p$ is referred to as a plastic shear strain rate and f_g as a flow criterion function for the crystallographic slip system g . Indeed, whether relation (1) or (2) has to be solved for a certain slip system g is unknown in advance because the flow criterion functions and plastic shear strain rates are unknown. The set of active constraints, i.e. the set of active slip systems $\mathbf{A} := \{g \in G \mid f_g = 0\}$, is usually prescribed following some assumption. The corresponding equation (1) is solved for each active slip system. The solution is accepted if it fulfills the inequalities in the Kuhn-Tucker condi-

tions. Otherwise, the set \mathbf{A} is updated until the appropriate solution is found. Thus, an iterative procedure is necessary for determination of \mathbf{A} . Evidently, this procedure contributes to the numerical expense of the integration strategy. Moreover, one should provide the iterative procedure for searching \mathbf{A} with a robust update rule for the set of active slip systems [1, 2]. The paper addresses the issue of a stress-update algorithm which avoids the mentioned iterative procedure.

Problem setting. In order to replace the inequalities, we introduce state variables v_g instead of $\dot{\lambda}_g^p$ for each slip system [3]:

$$v_g = \dot{\lambda}_g^p + \xi f_g, \quad \xi > 0, \quad g \in G, \quad (3)$$

with an arbitrary positive parameter ξ . These state variables uniquely determine the unknown set of active slip systems:

$$\mathbf{A} = \{g \in G \mid v_g \geq 0\}, \quad (4)$$

and the plastic shear strain rates:

$$\dot{\lambda}_g^p = \langle v_g \rangle_+, \quad (5)$$

where $\langle x \rangle_+$ are the McCauley brackets, and $\langle x \rangle_- := x - \langle x \rangle_+$. The conditions (1) and (2) are therefore equivalent to the following equations:

$$\langle v_g \rangle_+ - \dot{\lambda}_g^p = 0, \quad (6)$$

$$\langle v_g \rangle_- - \xi f_g = 0, \quad \forall \xi > 0. \quad (7)$$

Thus, if the plastic strain rate tensor is given by an associative flow rule:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{g \in G} \dot{\lambda}_g^p \cdot \partial f_g(\boldsymbol{\sigma}) / \partial \boldsymbol{\sigma}, \quad (8)$$

then with regards to the new state variables holds:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p = \sum_{g \in G} \langle v_g \rangle_+ \cdot \partial f_g(\boldsymbol{\sigma}) / \partial \boldsymbol{\sigma}. \quad (9)$$

The stress tensor is further computed due to the linear relation

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}^p), \quad (10)$$

where \mathbf{C} represents the fourth-order elasticity tensor.

The new formulation (6) and (7) of the Kuhn-Tucker conditions is free of inequalities. It includes only equations with respect to the state variables v_g . The latter can be found using conventional solvers for systems of non-linear equations.

Results. The performance of the presented stress-update algorithm is demonstrated due to integration of a crystallographic constitutive model for fcc single-crystals. It regards twelve octahedral and six cubic slip systems. Moreover, the model accounts for coupling of plasticity and viscoplasticity [4]. It contains two boundaries: an elastic one and a viscoplastic one. Between the boundaries, the only contribution to yielding is the rate dependent viscoplastic mechanism; the viscoplastic strain tensor is given by:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{vp} = \sum_{g \in G} \dot{\gamma}_g^{vp} \cdot \boldsymbol{\mu}_g, \quad (11)$$

where μ_g denotes the orientation tensor corresponding to the slip system g . Once the viscoplastic boundary is reached, an additional rate independent flow mechanism becomes active. Thus, construction of a robust iterative procedure for searching active slip systems becomes an intricate task since the respective update rule should distinguish between the viscoplastically- (lying between the boundaries) and plastically-active (lying on the viscoplastic boundary) slip systems [4]. On the contrary, the stress-update algorithm dealing with the alternative formulation overcomes searching for active slip systems. Moreover, the numerical examples demonstrate essential computational efficiency of the presented algorithm as compared to those searching iteratively for the active slip systems [3]. The incremental form of the model was implemented through the UMAT subroutine in the ABAQUS finite element program. Examples of simulations of the uniaxial tension in [001] direction are demonstrated in fig. 1. Depending on the size of the viscoplastic region (*i.e.* between the elastic and the viscoplastic boundaries of the model), three possible responses beyond the elastic domain can be initiated: pure viscoplasticity, pure plasticity as well as a coupled viscoplastic/plastic response.

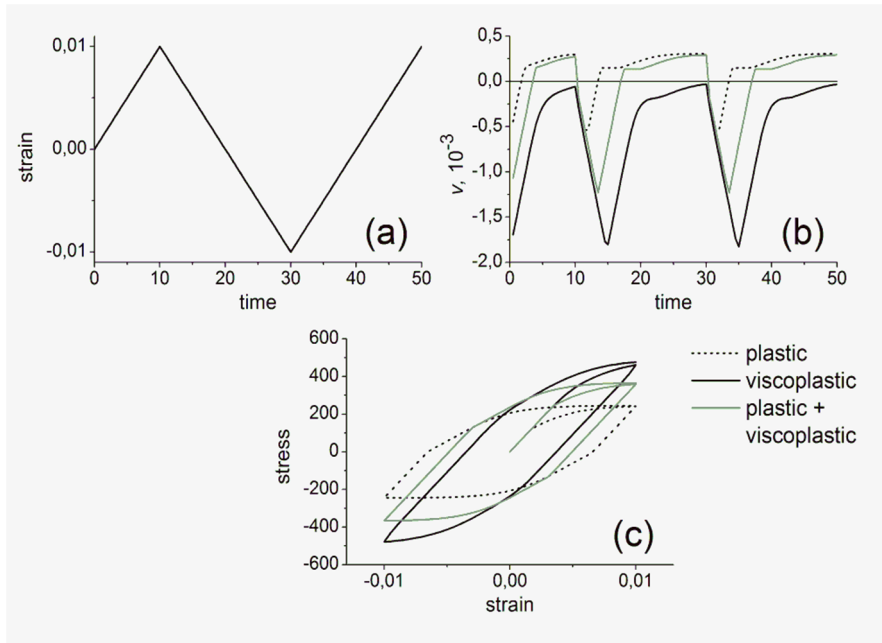


Fig. 1: Simulation of tension in [001] crystal orientation for three virtual materials, which differ in the range of the viscoplastic region. Eight octahedral slip systems are identically loaded. (a) Prescribed strain. (b) State functions for the active slip systems. The positive values reflect exactly the plastic shear strain rate (5). (c) Stress response.

Conclusions. A novel mathematical approach has been proposed for efficient integration of the crystallographic constitutive models whose formulations include the Kuhn-Tucker conditions. It has been shown that the mathematical problem can be reformulated such that the new formulations include only equations with respect to new unknown variables. Hence, the modified formulations are suitable for numerical analysis using established powerful mathematical methods developed for solving systems of non-linear equations. The computational efficiency was demonstrated by simulation of a tensile test in the [001] orientation.

References

1. Miehe, C., Schröder, J. A comparative study of stress update algorithms for rate-independent and rate-dependent crystal plasticity // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 2001. – Vol. 50. – pp. 273–298.
2. Simo, J. C., Huhges, T. J. R. // Computational Inelasticity. Interdisciplinary Applied Mathematics. – New York: Springer Verlag. – 1998. – 392 p.
3. Kindrachuk, V. M., Galanov, B. A. An efficient approach for numerical treatment of some inequalities in solid mechanics on examples of Kuhn–Tucker and Signorini–Fichera conditions // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. – 2014. – Vol. 63. – pp. 432–450.
4. Kindrachuk, V. M., Fedelich, B. Stress update algorithm for the combined viscoplastic and plastic behaviours of single-crystal superalloys // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 2011. – Vol. 88(1). – pp. 83–102.

Стаття надійшла до редакції 16.09.2019.

В. М. КИДРАЧУК

УДОСКОНАЛЕНИЙ МАТЕМАТИЧНИЙ ПІДХІД ДО ІНТЕГРУВАННЯ КОНСТИТУТИВНИХ СПІВВІДНОШЕНЬ ЗАДАЧІ ПЛАСТИЧНОЇ ТЕЧІЇ МОНОКРИСТАЛІЧНИХ СУПЕРСПЛАВІВ

Лопатки газових турбін працюють за умов комплексних термомеханічних навантажень, котрі супроводжуються повзучістю, релаксацією і перерозподілом напружень та також циклічними навантаженнями. Для монокристалічних суперсплавів вирішальне значення має також залежність від просторової орієнтації кристалу. Отже, інтегрування континуальних моделей, котрі реалістично відображають деформацію лопаток в умовах експлуатації, потребують надійних чисельних алгоритмів.

Конститутивні співвідношення задачі пластичної течії монокристалу містять сукупність рівнянь та нерівностей, що також відомі як умови Куна-Такера. Оскільки активні системи ковзання (активні обмеження в умовах Куна-Такера) заздалегідь невідомі, набір рівнянь, що підлягають розв'язанню, є також невизначеним. Класична стратегія полягає в ітеративному пошуку активних систем ковзання шляхом їх перебору згідно з певним правилом. Таким чином, на кожному кроці пошуку припускається певний склад активних систем ковзання. Сама процедура триває доки не буде отриманий розв'язок, що задовольняє усім умовам Куна-Такера. Класична стратегія призводить до значних обчислювальних витрат зумовлених процедурою перебору систем ковзань. Окрім того, питання збіжності цієї процедури залишається відкритим. У статті розглянуто альтернативний математичний підхід, котрий дозволяє уникнути ітеративного перебору систем ковзань. З цією метою застосовується математична теорія алгебри логіки для заміни нерівностей рівняннями. Конститутивні співвідношення можна тоді сформулювати виключно у вигляді рівнянь щодо нових невідомих. Вони однозначно пов'язані з невідомими вихідної задачі.

Обчислювальна ефективність запропонованого підходу продемонстрована на прикладі інтегрування рівнянь течії для монокристала з гранецентрованою кубічною ґраткою (ґцк). Припускається, що зсув відбувається по дванадцяти октаедральним та шести кубічним системам ковзання. Для більш загального розгляду враховується в'язкопластична течія, котра реалістично відтворює деформацію суперсплавів за високих робочих температур.

Ключові слова: конститутивні співвідношення, пластична течія, інтегрування еволюційних рівнянь, пошук активних систем ковзання.

Кіндрачук Віталій Мирославович – Ph.D., науковий співробітник Федерального інституту дослідження та випробовування матеріалів, відділ експериментальної та обчислювальної механіки матеріалів, проспект Унтер ден Айхен, 87, м. Берлін, Німеччина, 12205, vitaliy.kindrachuk@bam.de.