一种基于储存能量密度的FFT晶体塑性相场模型，用于微观力学疲劳开裂

S. Lucarini[a,*], F.P.E. Dunne[b], E. Martínez-Pañeda[a,*]

[a]伦敦帝国理工学院土木与环境工程系，伦敦，*SW7 2AZ*，英国[b]伦敦帝国理工学院材料系，伦敦，*SW7 2AZ*，英国

arXiv:2304.01125v1 [cs.CE] 3 Apr 2023

摘要

本文提出一种新型的基于FFT的相场断裂框架，用于模拟微观尺度上的疲劳裂纹萌生与扩展。本文基于储存能和位错密度定义损伤驱动力，将相场断裂与微观组织疲劳损伤联系起来。该公式通过快速傅里叶变换方法进行数值实现，以支持对足够大且具有代表性的三维微观组织区域进行建模。本文模拟了疲劳开裂的早期阶段，预测裂纹路径、扩展速率及其对相关微观组织特征的敏感性。研究展示了裂纹在单晶中的晶面扩展；对多晶固体的分析则揭示了穿晶裂纹萌生和沿晶体学方向的裂纹扩展。

关键词：快速傅里叶变换方法、相场断裂、晶体塑性、疲劳指标参数、多晶体

1. 引言

金属合金中的疲劳损伤可以说是威胁工程构件服役寿命的最大因素 [1]。因此，服役寿命预测取决于我们能否对疲劳损伤的各个阶段进行建模，从疲劳裂纹形核到其扩展和失稳破坏 [2]。在航空、汽车等许多应用领域和行业中，宏观裂纹的形成占疲劳寿命中相当重要的一部分。因此，预测疲劳裂纹萌生和短裂纹扩展阶段具有重要的科学和技术意义。然而，疲劳损伤的这些早期阶段对微观组织非常敏感 [3], ，这在一定程度上解释了疲劳寿命中观察到的差异 [4, 5],

*通讯作者电子邮箱：s.lucarini@imperial.ac.uk (S. Lucarini), e.martinez-paneda@imperial.ac.uk (E. Martínez-Pañeda)

因此，需要开发能够捕捉塑性变形的微观组织局部化，以及这种塑性局部化如何导致微观裂纹形成，并使其进一步扩展为宏观裂纹的模型。

近期针对多晶金属中疲劳裂纹萌生期和早期扩展阶段的建模方法，通常以基于微观力学的模型和疲劳驱动力定义为基础。例如，萌生阶段通常采用所谓的疲劳指标参数（FIPs）进行描述，这些参数是根据微观力学场得到的疲劳开裂替代性度量 [6]。FIPs 通过多晶计算均匀化模型进行估算；在这类模型中，通过对微观结构的周期性代表性体积单元（RVE）求解边值问题，可以预测特定微观结构所产生的宏观响应。该 RVE 通常由多个晶粒组成，并采用适当的晶体塑性模型对其进行建模 [7]。尽管基于 FIPs 的方法为考虑微观结构对疲劳寿命的影响提供了颇具潜力的途径 [8], ，但无法描述裂纹萌生的不同阶段，即形核和短裂纹扩展。理解这些阶段对于设计抗疲劳微观结构，以及预测晶粒尺寸、分布和形貌等微观组织特征对疲劳寿命的影响至关重要 [9]。近期，研究者致力于改进多晶计算均匀化模型，以考虑短疲劳裂纹扩展阶段 [10, 11]。实现这一目标的方式是建立合适的疲劳驱动力定义，例如基于储存能量密度的定义 [12]。然而，迄今为止，这些分析仅限于采用有限元方法，而有限元方法难以处理大型代表性体积单元 [13], ；此外，离散断裂方法（如扩展有限元法）也无法捕捉复杂的开裂情形（3D、裂纹分叉和合并等）[14–16]。利用近期在高效计算技术（如基于快速傅里叶变换（ FFT ）的方法）以及稳健的弥散型（相场）断裂力学模型开发方面取得的进展，有望为短疲劳裂纹扩展建模带来重大突破。

近年来，相场断裂方法 [17–19]因其灵活性、稳健性、易于实现，以及能够模拟先进断裂现象而广受欢迎，例如从任意位置发生的裂纹形核 [20, 21], 、复杂的裂纹轨迹[22, 23], 和多条裂纹间的相互作用 [24, 25], ，并且适用于任意几何形状和维度，且可直接在原有限元网格上进行建模。与离散断裂方法不同，相场断裂模型

将界面弥散于有限域内，并使用辅助变量追踪裂纹-固体界面的演化，无需重新网格划分，也无需采用特定的裂纹扩展判据 [17, 26]。相场断裂模型最初用于模拟脆性断裂，后来扩展至延性断裂 [27–30], 、疲劳 [31–34] 和化学-力学损伤 [35–38],等领域。近期，相场断裂也被用于模拟静载荷下多晶材料中的裂纹萌生与扩展 [39–41]。

尽管相场断裂与微观力学建模相结合前景广阔，但其在疲劳问题中的应用受到计算成本的限制。要准确预测疲劳行为，通常需要模拟足够多的循环次数，并采用较大的代表性体积单元 [42], ；而相场模拟所用网格必须足够精细，才能解析相场长度尺度。采用基于快速傅里叶变换的方法 [43, 44],可以克服这一障碍：这类方法利用周期场在傅里叶空间中导数的性质，与有限元方法 [13]相比，具有显著的数值计算性能优势。对于具有 n个自由度的模型，基于FFT的方法的计算复杂度为 $n\log\ n$，而有限元方法（迭代求解器）的计算复杂度为 $\mathcal{O}(n^2)$。此外，FFT 求解器还存在可扩展性问题，或受到高相对比度的限制。近期研究表明，基于FFT的方法有望加速相场断裂计算 [45–47]。

在本研究中，我们将基于 FFT 的建模与相场断裂相结合，以研究多晶材料中疲劳裂纹的形核与短程扩展。我们提出了一种新颖的公式，基于裂纹尖端储存能量密度概念定义新的相场断裂驱动力 [11, 12], ，从而将相场断裂模型扩展至形核和短疲劳裂纹扩展的模拟。本文通过若干案例研究展示该框架如何预测由塑性局部化导致的疲劳裂纹形核，以及随后可能出现的短裂纹路径；该框架能够自然地考虑微观结构效应以及向宏观开裂的转变。此外，采用 FFT 求解器可提高计算效率，并支持在相关循环次数范围内模拟足够大的三维代表性体积单元。本文其余部分安排如下：第2节介绍所提出的理论框架，该框架结合了晶体塑性、相场断裂以及疲劳裂纹尖端储存能量密度概念。第3节介绍所采用的数值程序，包括控制方程的快速傅里叶变换公式和求解算法。第4节将展示在多晶材料上开展的二维和三维数值实验结果

，并对结果进行相应讨论。最后，本文以第5节的结论作结。

2. 一种基于晶体塑性的相场疲劳模型

本节在单晶和多晶的晶体塑性微观力学框架下，建立短疲劳裂纹扩展的相场公式。利用裂纹相场及其梯度对裂纹的尖锐拓扑进行正则化；裂纹演化则由弹性和塑性应变能的累积驱动，并通过基于储存能量密度参数的唯象准则加以描述。下文将介绍晶体塑性模型的本构关系、相场断裂描述和唯象疲劳驱动力，以及它们之间的相互作用。

2.1. 晶体塑性本构方程

本文采用的晶体塑性公式遵循 Dunne 提出的基于位错的模型等。 [48, 49]。需要强调的是，本微观力学相场疲劳模型可直接用于任何其他晶体塑性行为的本构选择。为求完整起见，下面简要概述本构定律。在连续介质框架下，考虑有限应变和旋转，假定总变形梯度 $\boldsymbol{F}$可乘法分解为弹性 $\boldsymbol{F}_{\text{部分}}$ 和塑性 $\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}$部分，分别表示晶格畸变和塑性滑移，即

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_{\mathrm{e}}\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}. \tag{1}$$

因此，总速度梯度 $\boldsymbol{L}$ 也可分解为弹性部分和塑性部分，并可按下式计算：

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_{\mathrm{e}} + \boldsymbol{F}_{\mathrm{e}} \cdot \boldsymbol{L}_{\mathrm{p}} \cdot \boldsymbol{F}_{\mathrm{e}}^{-1} \tag{2}$$

其中， $\boldsymbol{L}_{\mathrm{e}}$ 表示弹性速度梯度， $\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}$ 表示塑性速度梯度。晶体塑性描述假设位错在滑移系上发生滑移， $\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}$ 则通过对所有活跃滑移系的塑性剪切应变率贡献求和来计算。因此，对于总滑移数 $\mathrm{N_s}$ （例如，面心立方晶格中的 $\mathrm{N_s} = 12$ ），塑性速度梯度为

$$\boldsymbol{L}_{\mathrm{p}} = \dot{\boldsymbol{F}}_{\mathrm{p}}\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}^{-1} = \sum_{i=1}^{\mathrm{N_s}} \dot{\gamma}^{\mathrm{i}} \mathbf{n}^{\mathrm{i}} \otimes \mathbf{s}^{\mathrm{i}} \tag{3}$$

其中， $\dot{\gamma}^{\mathrm{i}}$ 为第 i 个滑移系的剪切应变率，$\mathbf{s}^{\mathrm{i}}$ 和 $\mathbf{n}^{\mathrm{i}}$ 分别表示沿第 i 个滑移面的方向向量和法向量。第 i 个滑移系上的塑性剪切应变率 $\dot{\gamma}^{\mathrm{i}}$ 可根据分解剪应力 τ^{i} 估算为 [48]:

$$\dot{\gamma}^{\mathrm{i}} = \rho_{\mathrm{m}} b^2 v_D \exp\left(-\frac{\Delta F}{kT}\right) \sinh\left[\frac{\left(\left|\tau^{\mathrm{i}}\right| - \tau_{\mathrm{c}}^{\mathrm{i}}\right) \Delta V}{kT}\right], \tag{4}$$

其中， ρ_{m} 是可动位错密度， v_D 是位错越过障碍物时的尝试跃迁频率， b 是伯格斯矢量， ΔF 是热激活能， k 是玻尔兹曼常数， T 是绝对温度（295 K）， $\tau_{\mathrm{c}}^{\mathrm{i}}$ 是第 i 个滑移系上的临界分解剪应力（CRSS）， ΔV 是激活体积。

式（4）中的机理滑移规律基于这样一种观点：位错迁移率受到位错钉扎的限制，直到热力学驱动力促使位错脱离这些钉扎点，从而产生速率相关滑移。这些滑移系上的临界分解剪应力遵循基于泰勒模型的硬化定律，其变化源于统计储存位错（SSDs）和几何必需位错（GNDs）密度的演化，因此

$$\tau_c^{\mathrm{i}} = \tau_{c0}^{\mathrm{i}} + \mu b \sqrt{\rho_{SSD} + \rho_{GND}} \tag{5}$$

其中， τ_{c0}^{i} 是初始临界分解剪应力， μ 是弹性剪切模量， ρ_{SSD} 和 ρ_{GND} 分别表示统计储存位错和几何必需位错的密度。假设统计储存位错密度随累积滑移演化，并使滑移系上的临界分解剪应力发生硬化。随后，统计储存位错密度的演化被定义为随等效塑性应变率线性变化，即

$$\dot{\rho}_{SSD} = \lambda \sqrt{\frac{2}{3} \boldsymbol{L}_{\mathrm{p}} : \boldsymbol{L}_{\mathrm{p}}} \tag{6}$$

其中， λ 为硬化系数。

几何必需位错会造成永久晶格曲率或塑性应变梯度，并可阻碍位错滑移 [50–52]。Nye张量 $\boldsymbol{\Lambda}$ [53]及其对塑性不相容性的表征可用于估算几何必需位错密度。因此，Nye张量 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的定义如下:

$$\boldsymbol{\Lambda} = \nabla_0 \times \boldsymbol{F}_{\mathrm{p}} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N_s}} \rho_{Gs}^{\mathrm{i}} \mathbf{b}^{\mathrm{i}} \otimes \mathbf{s}^{\mathrm{i}} + \rho_{Ge}^{\mathrm{i}} \mathbf{b}^{\mathrm{i}} \otimes \mathbf{t}^{\mathrm{i}}, \tag{7}$$

其中， $\nabla_0 \times$ 表示参考构形中的旋度， $\rho_{\mathrm{G_s}}^{\mathrm{i}}$ 和 $\rho_{\mathrm{G_e}}^{\mathrm{i}}$ 分别表示纯螺型和纯刃型独立位错分量，$\mathbf{b}^{\mathrm{i}}$ 和$\mathbf{t}^{\mathrm{i}}$ 分别表示伯格斯矢量和第 i 个滑移面方向的切向量。在 FFC晶格中，

纯刃型和螺型位错段的数量分别为 12 和 6。随后，采用 L_2 范数方案处理几何必需位错解固有的非唯一性：该方案通过最小化所得位错密度向量的平方和，求得位错密度的螺型和刃型分量，从而得到以下标量几何必需位错密度值 [54]:

$$\rho_{GND} = \sqrt{\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{N_s}} \left(\rho_{Gs}^{\mathrm{i}}\right)^2 + \left(\rho_{Ge}^{\mathrm{i}}\right)^2}. \tag{8}$$

请注意，只有在塑性变形较小且边界错取向较低时，才适用平滑塑性变形梯度场的假设；该假设还会导致大角度晶界和已有损伤区的几何必需位错效应人为增大。

2.2. 断裂的相场建模

裂纹的形核与扩展通过相场描述来表征，其中引入一个辅助场变量（相场 ϕ）来描述裂纹-完整材料界面。该场变量 ϕ 在给定区间内呈连续、平滑的过渡，例如 $\phi \in [0,1]$；在未损伤相中取下限值（$\phi = 0$），在完全开裂材料点处取上限值（$\phi = 1$）。通常假设相场变量根据储存能与断裂能之间的平衡演化，并遵循格里菲斯最初针对脆性固体提出的能量平衡原理 [55]。因此，固体的势能Ψ 可表示为机械储能与断裂能的加和分解，在参考构形下写为

$$\Psi\left(\boldsymbol{F}, \Gamma_0\right) = \int_{\Omega_0} W(\boldsymbol{F})\ \mathrm{d}\Omega_0 + \int_{\Gamma_0} \mathcal{G}_c^0\ \mathrm{d}\Gamma_0 \tag{9}$$

其中， W 表示单位体积的储存应变能，$\mathcal{G}_c^0$ 表示单位面积的临界断裂能。式（9）的相场正则化形式引入裂纹密度函数 Γ_c，以对裂纹表面的能量贡献进行体积近似，从而能够根据储存能与断裂能之间的交换预测裂纹的演化 [17, 56];

$$\tilde{\Psi}\left(\boldsymbol{F}, \phi\right) = \int_{\Omega_0} g\left(\phi\right) W\left(\boldsymbol{F}\right)\ \mathrm{d}\Omega_0 + \int_{\Omega_0} \mathcal{G}_c^0 \Gamma_c\left(\phi, \nabla\phi\right)\ \mathrm{d}\Omega_0 \tag{10}$$

这里， $g(\phi)$ 是降低材料刚度的退化函数，我们假设其采用二次形式:

$$g\left(\phi\right) = \left(1-\phi\right)^2 + k \tag{11}$$

其中， k 是防止力学平衡方程组变为奇异的残余数值刚度。在本研究中，假设 $k = 10^{-5}$ ，因此为简便起见，后文省略这一数值项。裂纹密度函数通常假设为 [17]

$$\Gamma_c(\phi, \nabla\phi) = \frac{1}{2\ell}\left(\phi^2 + \ell^2 |\nabla\phi|^2\right) \tag{12}$$

其中， $\ell \in \mathbb{R}^+$ 是决定正则化裂纹宽度的长度尺度参数。

为将该理论扩展至延性材料，将有效塑性功贡献 W_p 纳入固体的总势能 [57]:

$$\tilde{\Psi}(\boldsymbol{F}, \phi, \boldsymbol{\alpha}) = \int_{\Omega_0} g(\phi)\left[W_{\mathrm{e}}(\boldsymbol{F}_{\mathrm{e}}) + W_{\mathrm{p}}(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{\alpha})\right] + \mathcal{G}_c^0 \Gamma_c(\phi, \nabla\phi)\ \mathrm{d}\Omega_0 \tag{13}$$

其中， $\boldsymbol{\alpha}$ 是内变量向量， W_{e} 是单位体积的弹性储存能。值得注意的是，塑性能会促进裂纹扩展，并以与弹性储存能类似的方式发生退化。从式（13）推导欧拉-拉格朗日方程，可直接观察到塑性应变对损伤演化的作用，由此得到以下强形式:

$$\left(\phi - \ell^2\nabla^2\phi\right) - 2(1-\phi)\mathcal{S}\left(\mathrm{state}\left(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{\alpha}\right)\right) = 0 \tag{14}$$

其中， $\mathcal{S}$（状态（$\boldsymbol{F}$， $\boldsymbol{\alpha}$））是裂纹驱动状态函数；对于传统相场断裂模型，该函数等于 $\mathcal{S}$（状态（$\boldsymbol{F}$， $\boldsymbol{\alpha}$））$= \ell/\mathcal{G}_c^0$（$W_{\mathrm{e}} + W_{\mathrm{p}}$）。此处对该断裂驱动力进行了重新表述，以将相场断裂建模扩展至微观结构疲劳裂纹萌生与扩展分析。

2.3. 微观结构疲劳裂纹的断裂驱动力

我们选择基于储能密度概念来确定相场断裂驱动力，因为该概念预测微观结构疲劳裂纹萌生与扩展的能力已得到证明[15, 58]。这种方法虽属唯象方法，却具有机理基础，将塑性功和位错密度与材料当前的疲劳损伤状态联系起来。在晶体塑性公式中，储存能量密度由塑性功中储存在局部位错结构内的比例确定，并按储能所跨越的长度尺度（位错平均自由程）进行归一化，从而

$$G_s = \int \frac{\xi\boldsymbol{\sigma} : \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{p}}}{\sqrt{\rho_{SSD} + \rho_{GND}}} \tag{15}$$

当储存能量密度达到临界值时，便会发生疲劳开裂， $G_s \to G_{crit}$。我们在相场断裂框架下融入这一概念，定义了一个新的裂纹驱动状态函数 $\mathcal{S}$（状态（$\boldsymbol{F}$， $\boldsymbol{\alpha}$））以及一个新的基于储能密度的阈值 W_{crit}。

通过为损伤起始设定阈值条件，可考虑条件 $G_s \to G_{crit}$ ，并将该条件纳入相场平衡方程。因此，将变量 W_{crit} 定义为储存能量密度达到临界值时弹性能与塑性能之和；即，

$$W_{\text{crit}} = \left(\max_{\tau \in [0,t]} \left(W_{\text{e}}^{+} \right) + W_{\text{p}} \right) \Big|_{G_s = G_{crit}}, \tag{16}$$

其中，$\max_{\tau\in[0,t]}(W_{\text{e}}^{+})$表示弹性应变能拉伸部分达到的最大值，其中对弹性张量应用谱分解 [59]。即，

$$W_{\text{e}}^{+}(\boldsymbol{\varepsilon}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{+}^{e} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}_{+}^{e}, \text{ with } \boldsymbol{\varepsilon}_{+}^{e} = \sum_{i=1}^{3} \left\langle \varepsilon_i^e \right\rangle_{+} \mathbf{n}_i \otimes \mathbf{n}_i \tag{17}$$

其中，$\left\langle \varepsilon_i^e \right\rangle_{+}$ 和$\mathbf{n}_i$ 是欧拉对数弹性应变张量的正特征值和特征向量（即，$\boldsymbol{\varepsilon}^e = 1/2 \ln\left(\boldsymbol{F}_{\text{e}} \boldsymbol{F}^{T}{}_{\text{e}}\right)$），$\mathbb{C}$ 表示晶格的各向异性四阶弹性刚度张量，该张量具有立方对称性。

随后，定义一个新的裂纹驱动状态函数：

$$\mathcal{S}\left(\text{state}\left(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{F}_{\text{p}}, \boldsymbol{\alpha}\right)\right) = \frac{\ell W_{\text{crit}}}{\mathcal{G}_c^0} \left\langle \frac{W_{\text{e}}^{+} + W_{\text{p}}}{W_{\text{crit}}} - 1 \right\rangle, \tag{18}$$

其中，$\langle x \rangle := (x + |x|)/2$ 表示麦考利括号。将公式（18）代入相场平衡方程（14）后，得到一个能够基于驱动微观组织疲劳损伤的机制使裂纹形核并扩展的模型。这里可以注意到两个尤为重要的特征。首先，尽管其他相场断裂模型也采用了损伤阈值的概念，但一直假定该阈值为常数。本文中，阈值 W_{crit} 高度依赖于局部储存能量密度。其次，可以在公式（18）中确定一个无量纲参数 $\zeta = \ell W_{\text{crit}}/\mathcal{G}_c^0$ ，该参数触发弹塑性贡献导致的损伤激活，并控制成核后行为。当 ζ取较大值时，相场损伤趋于急剧增加；而当 ζ较小时，则可获得较低的扩展速率。此外， ζ 取决于局部储存能量密度参数，这表明需要通过实验标定来确定最准确的 $W_{\text{crit}}/\mathcal{G}_c^0$ 关系。在本工作中，假定 $\mathcal{G}_c^0$ 与 W_{crit}成正比，并为简化起见，假定 ζ 为常数且等于1（即，可根据 ℓ 和 W_{crit} 的取值估计 $\mathcal{G}_c^0$ 的大小）。

3. 数值程序

本节介绍数值实现的细节。采用基于FFT的求解器求解力学边值问题和相场控制方程，以预测疲劳裂纹的起始与扩展。使用交替最小化方法计算所得耦合非线性方程组的解。该实现通过 `FFTMAD` 软件包 [13], 完成，并与Abaqus `UMAT`子程序封装，用于计算本构方程。

3.1. 基于*FFT*的 *formulation* 的控制方程

对于变形方程和相场方程，我们均采用FFT谱方法求解周期性边值问题，并假设处于准静态条件下。场方程定义在尺寸为 $L_1 \cdot L_2 \cdot L_3$ 的周期性平行六面体区域 Ω 中，同时考虑周期性几何形状和周期性边界条件。

我们首先给出耦合问题的强形式。对于参考构形下的线动量平衡，考虑退化函数 (11) 和混合求解方案 [60], ，可得

$$\nabla_0 \cdot \left[(1-\phi)^2 \boldsymbol{P}\left(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}, \boldsymbol{\alpha}\right) \right] = 0 \tag{19}$$

其中， $\boldsymbol{P}$ 为第一类Piola-Kirchhoff应力张量， $\nabla_0 \cdot$ 表示参考构形下的散度算子。方程 (19) 在内变量 $\boldsymbol{\alpha}$ 满足演化定律的约束下求解，即

$$\dot{\boldsymbol{\alpha}} = \dot{\boldsymbol{\alpha}}\left(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}, \boldsymbol{\alpha}\right) \tag{20}$$

该演化定律遵循晶体塑性本构定律（第 2.1 节）。另一方面，相场平衡方程为

$$\left(\phi - \ell^2 \nabla_0^2 \phi\right) - 2\left(1-\phi\right) \frac{\ell W_{\mathrm{crit}}}{\mathcal{G}_c^0} \left\langle \frac{W_{\mathrm{e}}^{+} + W_{\mathrm{p}}}{W_{\mathrm{crit}}} - 1 \right\rangle = 0 \tag{21}$$

其中， ∇_0^2 是参考构形中的拉普拉斯算子，并引入了新定义的裂纹驱动状态函数 $\mathcal{S}$ (18)。

在傅里叶方法中，区域 Ω 被离散化为包含$N_1 \cdot N_2 \cdot N_3$个体素的体素化规则网格。问题中涉及的场将由各体素中心处的值表示。傅里叶空间被离散化为相同数量的频率，而

定义在 Ω 中的函数的傅里叶变换通过对离散场进行离散傅里叶变换获得，并使用快速傅里叶变换算法计算。傅里叶空间离散化由频率向量定义

$$\boldsymbol{\xi} = \xi_i = 2\pi \frac{n_i - \lfloor N_i/2 \rfloor}{L_i} \quad \text{for} \quad n_i = 0, \ldots, N_i - 1 \tag{22}$$

其中， n_i 为频率编号， L_i 和 N_i 分别为区域 Ω 在 i方向上的长度以及将其离散化后的体素数。

随后，利用空间导数对应的频率将方程（19）和（21）转换到傅里叶空间，得到

$$\mathcal{F}\left\{(1-\phi)^2 \boldsymbol{P}\left(\boldsymbol{F}, \boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}, \boldsymbol{\alpha}\right)\right\} \cdot i\boldsymbol{\xi} = 0 \tag{23}$$

$$\left(\phi - \ell^2 \mathcal{F}^{-1}\left\{i^2 \boldsymbol{\xi}^2 \mathcal{F}\left\{\phi\right\}\right\}\right) - 2\left(1-\phi\right) \frac{\ell W_{\mathrm{crit}}}{\mathcal{G}_c^0} \left\langle \frac{W_{\mathrm{e}}^+ + W_{\mathrm{p}}}{W_{\mathrm{crit}}} - 1 \right\rangle = 0 \tag{24}$$

其中， $\mathcal{F}^{-1}$ 和 $\mathcal{F}$ 分别表示实值函数的逆傅里叶变换和正傅里叶变换， i 为虚数单位。

对于线动量平衡，采用牛顿-拉夫森迭代，并对方程（23）进行线性化。对于给定的迭代步，变形梯度被定义为傅里叶空间中的位移场 $\widehat{\mathbf{u}}_i$ 和宏观变形梯度$\boldsymbol{F}$ 的函数:

—

$$\boldsymbol{F}_i = \mathcal{F}^{-1}\left\{\widehat{\mathbf{u}}_i \otimes \boldsymbol{\xi}\right\} + \overline{\boldsymbol{F}} \tag{25}$$

随后，对位移场施加修正量 $\delta\widehat{\mathbf{u}}$，使其满足 $\widehat{\mathbf{u}} = \widehat{\mathbf{u}}_i + \delta\widehat{\mathbf{u}}$，线性化力学平衡方程为

$$\mathcal{F}\left\{\left(1-\phi\right)^2 \left.\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{F}}\right|_i : \mathcal{F}^{-1}\left\{\delta\widehat{\mathbf{u}} \otimes i\boldsymbol{\xi}\right\}\right\} \cdot i\boldsymbol{\xi} = -\mathcal{F}\left\{\left(1-\phi\right)^2 \boldsymbol{P}_i\right\} \cdot i\boldsymbol{\xi} \tag{26}$$

为 $\boldsymbol{P}_i = \boldsymbol{P}(\boldsymbol{F}_i, \boldsymbol{\alpha}_i)$，并要求定义一致切线 $\mathbb{K} = \left.\frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \boldsymbol{F}}\right|_i$。对于应变控制试验， $\boldsymbol{F}$是施加的宏观应变，作为问题的输入边界条件。考虑实傅里叶变换对称性后，该线性方程组得以约简，并采用克雷洛夫求解器（广义最小残差法，GMRES，相对容差为$tol_{lin} = 10^{-5}$）求解，这与文献 [61], 提出的 DBFFT方法类似；该文献推导了应力/混合控制扩展。当参考构形中位移修正的梯度足够小 $\|\nabla_0 \delta\mathbf{u}\|_\infty / \|\boldsymbol{F}_i - \boldsymbol{F}_t\|_\infty < 5 \cdot 10^{-3}$时，即认为牛顿-拉夫森迭代收敛。该方案需要进行预条件处理，以求解由下式给出的方程组

（24）和（26）。此处使用的预条件器是在傅里叶空间中定义的算子，如$\widehat{}$下所示。对于线性化力学问题，预条件算子 $\mathbb{M}_{\mathbf{u}}$ 表示为

$$\widehat{\mathbb{M}}_{\mathbf{u}}\left(\boldsymbol{\xi}\right)\left(*\right)=\left[\boldsymbol{\xi}\cdot\overline{\mathbb{K}}\cdot\boldsymbol{\xi}\right]^{-1}\cdot*\tag{27}$$

其中，$\overline{}\mathbb{K}$ 为体积平均一致切线张量

$$\overline{\mathbb{K}}=\frac{1}{V_{\Omega}}\int_{\Omega}\mathbb{K}\left(\mathbf{x}\right)\mathrm{d}\Omega\tag{28}$$

而 V_{Ω} 表示整个域 Ω 的体积。对于相场平衡，预条件算子 $\mathbb{M}_{\phi}$ 定义为

$$\widehat{\mathbb{M}}_{\phi}\left(\boldsymbol{\xi}\right)\left(*\right)=\left[1+\boldsymbol{\xi}^{2}\right]^{-1}*\tag{29}$$

并应用于式（24）。

最后，利用傅里叶微分性质计算 Nye 张量 $\boldsymbol{\Lambda}$ （式 7），因此其在傅里叶空间中的表达式更为简单，即

$$\boldsymbol{\Lambda}=\mathcal{F}^{-1}\left\{i\boldsymbol{\xi}\times\mathcal{F}\left\{\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}^{T}\right\}\right\},\tag{30}$$

其中，$\times$ 表示叉积。通常在每个晶体域内计算 Nye 张量 $\boldsymbol{\Lambda}$，然后在多晶均质化过程中求得位错密度。由于塑性应变场在晶体边界处存在奇异性，这种方法可能会产生问题。本研究假设塑性变形梯度场是光滑的（如参考文献[62]所示），并在整个域内计算塑性应变不相容性。此外，为避免离散化效应，在计算 Nye 张量时采用正则化技术。因此，按照参考文献 [63], ，我们通过在傅里叶空间中求解以下方程来估算塑性变形梯度的空间变化，

$$\widetilde{\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}}-\ell_{\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}}\nabla_{0}^{2}\widetilde{\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}}=\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}\tag{31}$$

其中，$\ell_{\boldsymbol{F}_{\mathrm{p}}}$ 是正则化的相关特征长度。

请注意，由于使用标准FFT导数且区域内包含高相对比度，所提出的FFT框架可能会出现吉布斯振荡现象。可采用缓解机制，例如使用离散导数定义 [64] 或FFT预条件有限元方案 [65],。

3.2. 非线性交替最小化

我们采用非线性交替最小化技术求解非线性耦合方程组（算法方案见算法1），其中包含隐式时间离散方法。因此，对于给定的时间增量，方程（26）和（24）以交错方式求解，并重复这一过程，直至满足基于每次迭代中解的最大相对修正量$tol = 5 \cdot 10^{-3}$ 的收敛容差，其中解包括位移和相场（见算法1）。此外，求解方程（24）时，还在求解器中施加额外约束，通过假设$\phi \geq 0$来确保损伤不可逆性，并在每次全局迭代中显式地将该约束施加于解场。

算法1： 对一个时间增量进行非线性交替最小化**数据：** $\boldsymbol{F}_t$, $\Delta\boldsymbol{F}$, Δt, tol, ϕ_t**结果：** $\boldsymbol{F}_{t+\Delta t}$, $\phi_{t+\Delta t}\boldsymbol{F}_0 \leftarrow \boldsymbol{F}_t + \Delta\boldsymbol{F}\phi^0 \leftarrow \phi_t i \leftarrow 1$**当** $\frac{\|\boldsymbol{F}_i - \boldsymbol{F}_{i-1}\|_\infty}{\|\boldsymbol{F}_i - \boldsymbol{F}_t\|_\infty} > tol$ **或** $\frac{\|\phi_i - \phi_{i-1}\|_\infty}{\|\phi_i - \phi_t\|_\infty} > tol$ **时** $\delta\mathbf{u} \leftarrow$ 使用牛顿-克雷洛夫求解器求解方程（23），容差为 tol 对于 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_{i-1}$和 $\phi = \phi_{i-1}\boldsymbol{F}_i \leftarrow \boldsymbol{F}_{i-1} + \nabla_0\delta\mathbf{u}\phi_i \leftarrow$使用克雷洛夫求解器求解方程（24），容差为 tol 对于 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_i$**如果** $\phi_i < \phi_t$ **则** $\phi_i = \phi_t$ **结束如果**；`/* Pointwise */`$i \leftarrow i + 1$**结束**$\boldsymbol{F}_{t+\Delta t} \leftarrow \boldsymbol{F}_i\phi_{t+\Delta t} \leftarrow \phi_i$

---

4. 数值算例与讨论

本节展示并讨论采用所提出框架在多种数值循环加载试验中获得的结果，包括单晶、双晶和多晶试样。在所有情况下，计算域均离散为由体素构成的规则网格，特征体素长度选为 $\ell_{voxel} = 0.78\ \mu\mathrm{m}$。这与先前的研究 [47] 一致，并能对晶粒结构的几何形状和形貌进行良好分辨

（≈1000体素/晶粒）。在不失一般性的前提下，我们采用应变控制单轴循环试验条件施加机械载荷，应变幅为$\varepsilon_{max}=2\%$，应变比为 $R_\varepsilon=0$，应变率为 $\dot{\varepsilon}=1\cdot10^{-3}\,\mathrm{s}^{-1}$。需要注意的是，相较于局部化效应显著、需采用包含微观结构缺陷的大型代表性体积单元进行准确分析的高周疲劳，这些加载条件会使塑性分布更加均匀。不过，该框架也可直接用于其他加载模式。数值试验针对面心立方晶体结构开展，所用晶体塑性参数对应于室温下的 CMSX-4 单晶（参见文献 [66]）；这些参数列于表 1。Nye 张量的计算采用特征正则化长度 2 个体素（$\ell_{\boldsymbol{F}_\mathrm{p}}=1.56\ \mu\mathrm{m}$），研究表明这是消除离散化效应所需的最小长度 [63]。相场参数的选取确保加载循环次数足够，使疲劳滞回环在裂纹形成与扩展前达到稳定。通过少数几个模拟循环即可预测疲劳裂纹形核现象，而从稳定疲劳响应中得出的结论可用于总寿命估算 [67]。具体而言，我们取 $G_{crit}=4\ \mathrm{J m^{-2}}$，并将相场长度尺度设为 $\ell=2.34\ \mu\mathrm{m}$，即特征体素长度的三倍，以确保结果不受离散化影响 [45]。需要注意的是，要对疲劳寿命进行定量估算，还需采用外推方案。

表1：晶体塑性模型所用参数。

参数	数值
弹性常数 C_{11} [GPa]	250
弹性常数 C_{12} [GPa]	161
弹性常数 C_{44} [GPa]	129
初始临界分解剪应力 τ_{c0} [MPa]	350
伯格斯矢量 b [mm]	3.5×10^{-7}
尝试位错跃迁的频率 v_D [$\mathrm{s^{-1}}$]	1×10^{11}
玻尔兹曼常数 k [$\mathrm{J K^{-1}}$]	1.4×10^{-23}
热激活能 ΔF [J]	4.9×10^{-20}
可动位错密度 ρ_m [$\mathrm{mm^{-2}}$]	5.0×10^{6}
硬化系数 λ [$\mathrm{mm^{-2}}$]	150×10^{6}

4.1. 单晶板随晶格取向变化的失效

第一个案例研究考察单晶板中微观结构疲劳裂纹的萌生与随后扩展如何随晶体取向而变化。样品如图1a所示，尺寸为 $L_x = 200\ \mu\text{m} \times L_y = 200\ \mu\text{m} \times L_z = 0.78\ \mu\text{m}$，离散为 $N_x = 256 \times N_y = 256 \times N_z = 1$ 个体素。在样品中心引入一条长度为 $50\ \mu\text{m}$、垂直于加载方向的初始裂纹（I型断裂）。出于数值计算的考虑，该贯穿厚度裂纹通过几何方式引入，因为若采用预损伤方式，则分析从开始时就需要处理损伤区域中的高水平塑性。具体而言，通过定义一个刚度为晶体原始刚度 10^{-5} 倍的线弹性材料区域来引入几何裂纹。该区域涵盖位于区域 $(3L_x/8, 5L_x/8)$、$(L_y/2 - L_y/N_y, L_y/2 + L_y/N_y)$ 内的体素。假设满足平面应力条件。分析了两种不同的取向：(i) 单晶沿 [100] 方向取向，使一个滑移系具有45度的优先取向；(ii) 旋转后的构型，其中 [111] 方向与载荷方向对齐并垂直于裂纹。图1展示了晶体取向，并附有样品示意图、加载条件以及两种取向下得到的宏观应力-应变循环曲线。

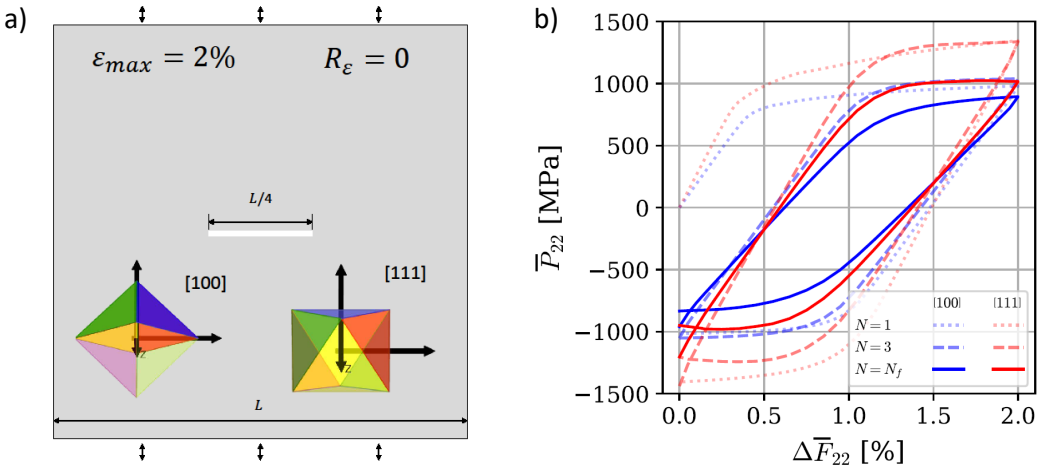

图 1：单晶板的疲劳失效与取向的关系：(a) 样品的几何形状、边界条件和晶体取向示意图；(b) 两种取向（[100] 和 [111]）在第一个循环、第三个循环和失效循环时得到的宏观应力-应变结果（2-垂直方向）。

应力-应变行为展示至失效循环 N_f，其中 $N_f = 6$ 对应 [100] 情况，$N_f = 4$ 对应 [111]分析。[111] 样品（红线）在整个循环历程中均表现出更高的刚度和强度响应。在这两种情况下，晶体的循环行为均迅速稳-

定下来，其中 $N = 3$ 结果对应于稳定后的应力-应变曲线。在裂纹贯穿整个试样并扩展之前，可观察到失效循环中存在一定程度的损伤影响。需要注意的是，循环加载过程中应力-应变循环曲线的变化源于滑移带形成、几何必需位错（GND）累积以及相场退化的演化。由此产生的储存能量分布和裂纹轨迹分别见图 2b 和图 2d 中的 [100] 和 [111]研究。

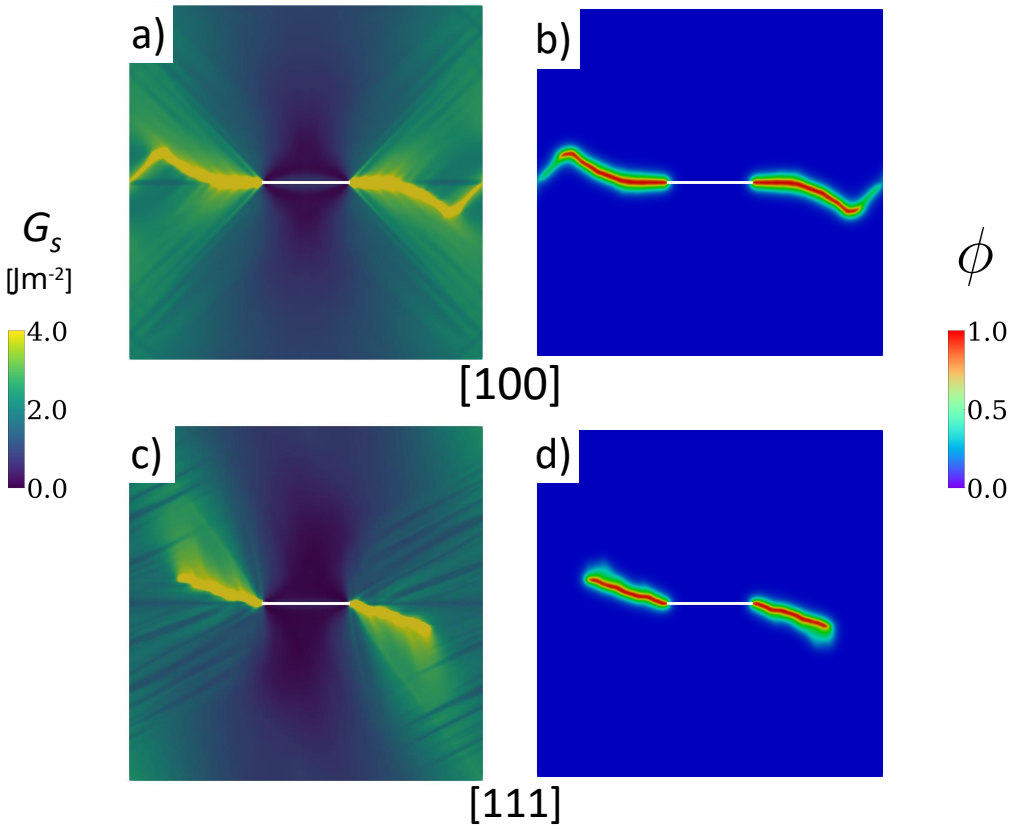

图 2：单晶板在不同取向下的疲劳失效： [100] （上）与 [111] （下）。子图 (a) 和 (c) 显示储存能量密度 G_s 等值线，子图 (b) 和 (d) 则给出了由相场等值线描述的预测裂纹轨迹。结果显示为失效循环N_f结束时的状态。

首先，考虑取向 [100] 下得到的结果，如图 2a 和 2b 所示。从裂纹扩展响应来看，可以观察到两个明显的行为阶段。初始时，塑性应变分布相对于初始裂纹呈对称状态，塑性主要集中在裂纹尖端附近，因此裂纹沿垂直于加载方向的路径以 I 型方式扩展。然而，循环加载会导致塑性累积并形成滑移带，如图 2a 中的 G_s 等值线所示。因此，裂纹最终偏离

I 型轨迹，转而沿晶体学平面扩展，其扩展是由储存能量密度的累积所驱动的。

沿 [111] 方向施加载荷时得到的结果如图 2c 和图 2d 所示。可以看出，塑性应变的分布相对于裂纹面呈不对称，其塑性应变和储存能量密度 G_s 集中在区域的左上部和右下部（见图 2c）。如图 2d 所示，这导致了混合模式开裂，裂纹沿着与初始裂纹形成 30° 角的两个晶体学平面扩展。因此，与该平面内垂直于和沿着初始裂纹的另外两个滑移系相比，这些滑移系占据主导地位。

模型预测表明，沿晶体学平面形成的滑移带会显著影响裂纹轨迹。这与实验观察结果一致：裂纹路径会与特定滑移面对齐，并在微观尺度 [68, 69]偏离 I 型轨迹。

4.2. 晶界取向对双晶板失效的影响

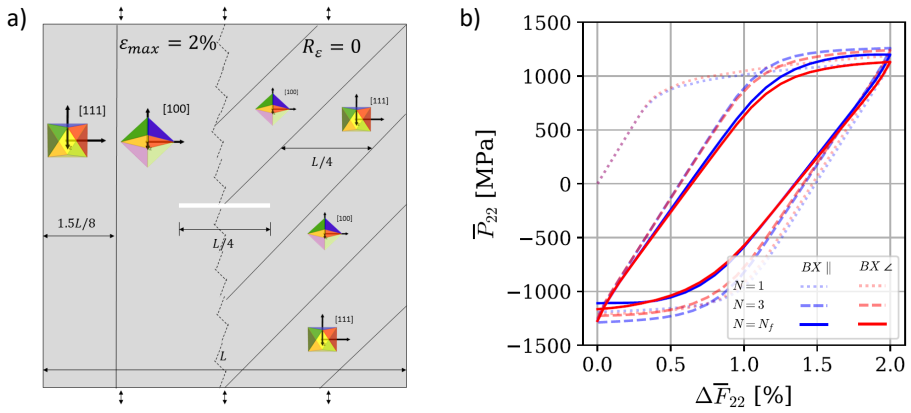

图 3：双晶板的疲劳失效随晶界取向的变化：(a) 样品的几何形状、边界条件以及晶体和晶界取向示意图；(b) 两种案例研究（晶界相对于初始裂纹平行和倾斜）在第一个循环、第三个循环和失效循环时的宏观应力-应变（竖直方向）结果。

第二个案例研究旨在预测裂纹扩展行为与晶界取向之间的相互作用。为此，研究采用一块双晶板，模拟前一项研究中的几何形状和边界条件。具体而言，板的尺寸为 $200\ \mu m \times 200\mu m \times 0.78\ \mu$，其中包含一条长度为 $50\ \mu m$ 的初始裂纹。离散化方式也相同；共 $256 \times 256 \times 1$ 个体素。然而，如图 3 所示，该案例研究将

区域划分为两种晶体学取向，[100]和 [111], ，并考虑两个案例研究：(i) 一个样品包含内部 [100] 部分和两个外部 [111] 区域，晶界与初始裂纹垂直对齐；(ii) 一个样品包含交替排列的 [100]和 [111]区域，晶界相对于初始裂纹倾斜 45° 。需要强调的是，在当前框架中，晶界构成具有不同属性的两个区域之间的界面，不涉及任何额外处理或建模假设。这自然会导致晶界附近塑性分布不均匀并产生几何必需位错。

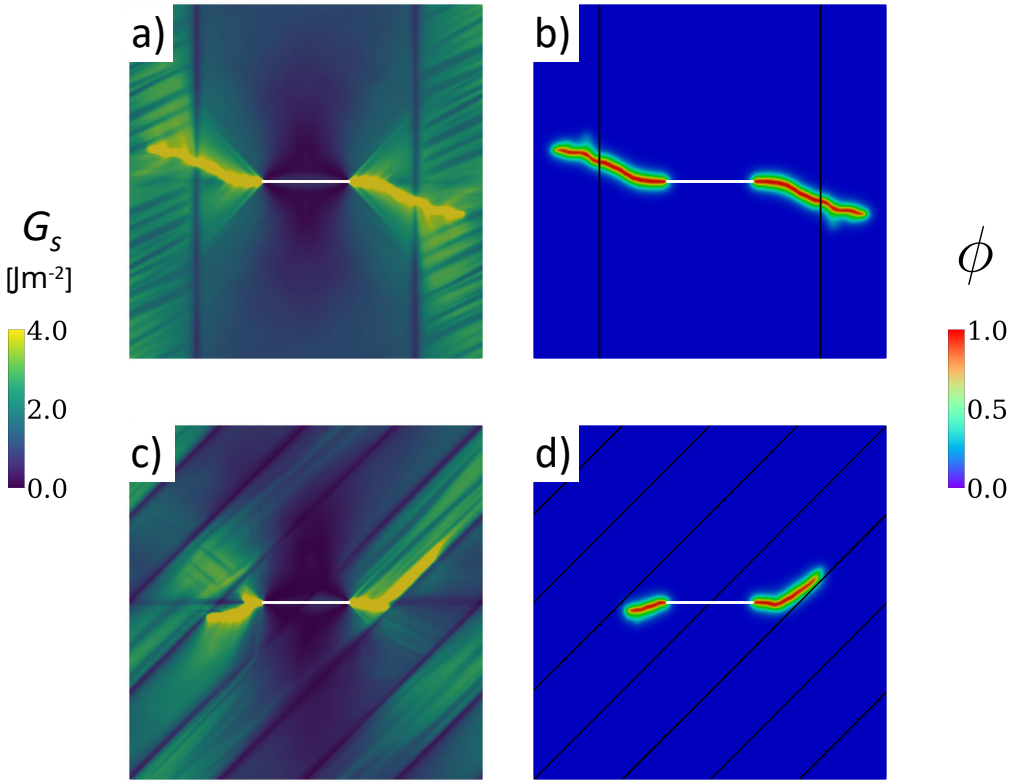

图4：双晶板的疲劳失效与晶界取向的关系：垂直于初始裂纹（上）与相对于初始裂纹倾斜 45° （下）。子图 (a) 和 (c) 显示储存能量密度 G_s 等值线，而子图 (b) 和 (d) 则给出由相场等值线描述的预测裂纹轨迹。结果展示于失效循环 N_f结束时。

所得宏观应力-应变响应如图3b所示。与前一个案例研究一样，两种双晶分析均仅需三个载荷循环，便迅速达到稳定的循环响应。此外，两种情形均在经历相同的循环次数（5次）后，才出现显著的裂纹扩展和载荷下降。晶界排列对宏观应力-应变响应的影响似乎微乎其微，因为所考虑的两种情形得出的结果几乎

完全相同。然而，如图4所示，微观裂纹轨迹则受到显著影响。

在这两种情况下，与前述案例研究一样，开裂模式都偏离了各向同性材料中预期的水平 I 型轨迹。图 4 的 G_s 等值线显示，这是由塑性累积和滑移带的形成所致。此外，还观察到位错密度与晶界之间的相互作用。因此，在晶界垂直于初始裂纹的案例研究中，裂纹能够穿过晶界（图 4a）。然而，当晶界相对于初始缺陷倾斜 45° 时，裂纹轨迹会发生偏转，裂纹沿晶界扩展。从图 4d 可以看出，这是位错密度与晶粒形貌相互作用的结果；在 $[100]$ 晶粒中，塑性集中于若干与晶界平行的滑移带上。因此，晶界被证明可作为裂纹扩展的屏障或优先路径。结果表明，该模型能够捕捉晶粒形貌、位错密度与裂纹轨迹之间的相互作用。

4.3. 二维多晶体中疲劳裂纹的形核与扩展

第三个案例研究旨在深入了解微观结构疲劳裂纹的形核和短裂纹扩展。考虑一块尺寸为 $200\ \mu\text{m} \times 200\ \mu\text{m} \times 0.78\mu\text{m}$的多晶板，假设其处于平面应力状态，并承受前文所述的循环边界条件。未引入初始裂纹，以便研究形核过程。计算域离散为 $256 \times 256 \times 1$ 个体素。该板共含有62个晶体，其取向随机，并服从对数正态分布，平均等效直径为 $30\ \mu\text{m}$，标准差为0.1。图5展示了所研究的周期性微观结构，同时给出了施密德因子大于0.35的滑移面投影线。图6展示了所得结果，包括塑性累积（G_s 等值线）和裂纹轨迹（ϕ 等值线）随循环次数的变化。

与模型假设一致，微观结构疲劳裂纹的形核由储存能量密度的累积驱动。如图 6 所示，最初几个循环中未观察到损伤，但储存能正在晶粒内部相对于加载方向倾斜的滑移带中累积。在这方面，需要注意的是，多晶体构型在晶界附近表现出显著的几何必需位错效应，晶界几何必需位错强化会导致塑性变形减小，因此 G_s 值较低。因此，该模型

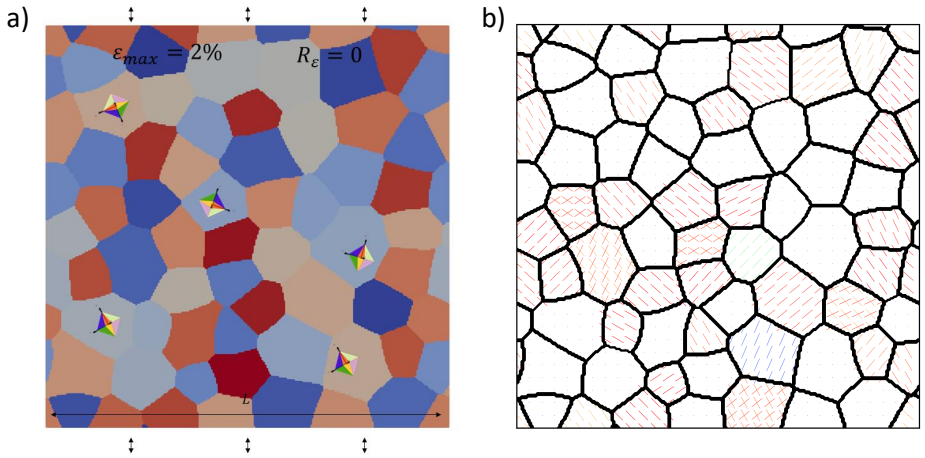

图5：多晶体中的裂纹形核与扩展：（a）几何形状、边界条件和晶粒分布；（b）样品微观结构，突出显示滑移面投影线（右侧）及施密德因子 >0.35。

会产生穿晶开裂，裂纹起源于晶粒内部，而非晶界处。为描述非晶体学开裂，可能需要根据所研究材料的特定微观组织特征或环境条件，修正临界储存能量密度参数的定义。

研究表明，裂纹孕育过程需要经历多个循环次数，主裂纹在施密德因子较高的某个晶粒的一个晶体学平面内形成。此外，在图6e中还可以观察到其他损伤区域，其中存在位错活动较为剧烈的区域，这些区域可作为潜在的次生裂纹形成位置。结果表明，基于断裂相场描述构建的当前框架能够适当地模拟裂纹形成。

疲劳裂纹形核后，微观结构短裂纹扩展过程会在几个循环次数内发生，如图6f所示。在某些情况下，裂纹沿特定晶面扩展，但也会因多个滑移系的共同作用而在某些晶粒内偏转；这表明，在多晶体环境中也呈现出前述案例研究中观察到的行为。例如，图6c中裂纹右端显示了两个处于活动状态的滑移系。当裂纹跨越多个晶粒后，由于周期性和有效面积减小，扩展变得不稳定。

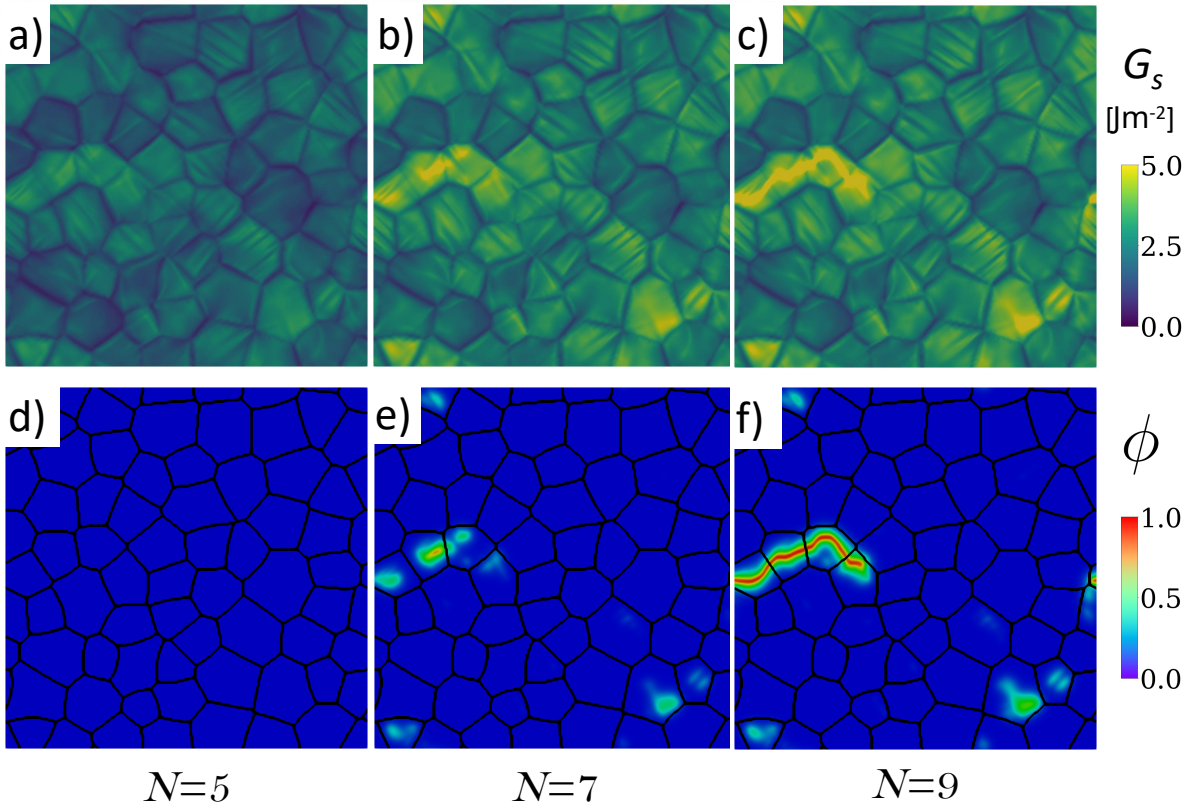

图6：多晶体中的裂纹形核与扩展：储存能量密度的预测 G_s（上）以及由相场等值线表示的裂纹轨迹（下）。结果随循环次数 N变化。

4.4. 三维多晶体中疲劳裂纹的形核与扩展

第四次数值实验展示了该建模框架利用快速傅里叶变换方法所带来的计算加速优势，在真实三维微观结构中预测复杂微观结构开裂现象的能力。具体而言，研究考虑了一个包含64个晶粒的立方体代表性体积单元。该代表性体积单元的尺寸为 100 μ米、 × 100 μ米、 × 100 μ米，并使用 128 × 128 × 128 个体素进行离散化，从而得到约 8×10^6 个自由度。合成生成的周期性微观结构服从对数正态分布，平均直径为 30 μ米，标准差为0.1。该代表性体积单元承受与前述案例研究相同的循环加载条件，并持续进行分析，直至观察到不稳定开裂。模型预测结果如图7所示，以储存能量密度 G_s 和相场 ϕ 等值线表示，并随加载循环次数 N变化。

结果表明，在第11次循环时，需要积累足够的储存能量密度参数 o

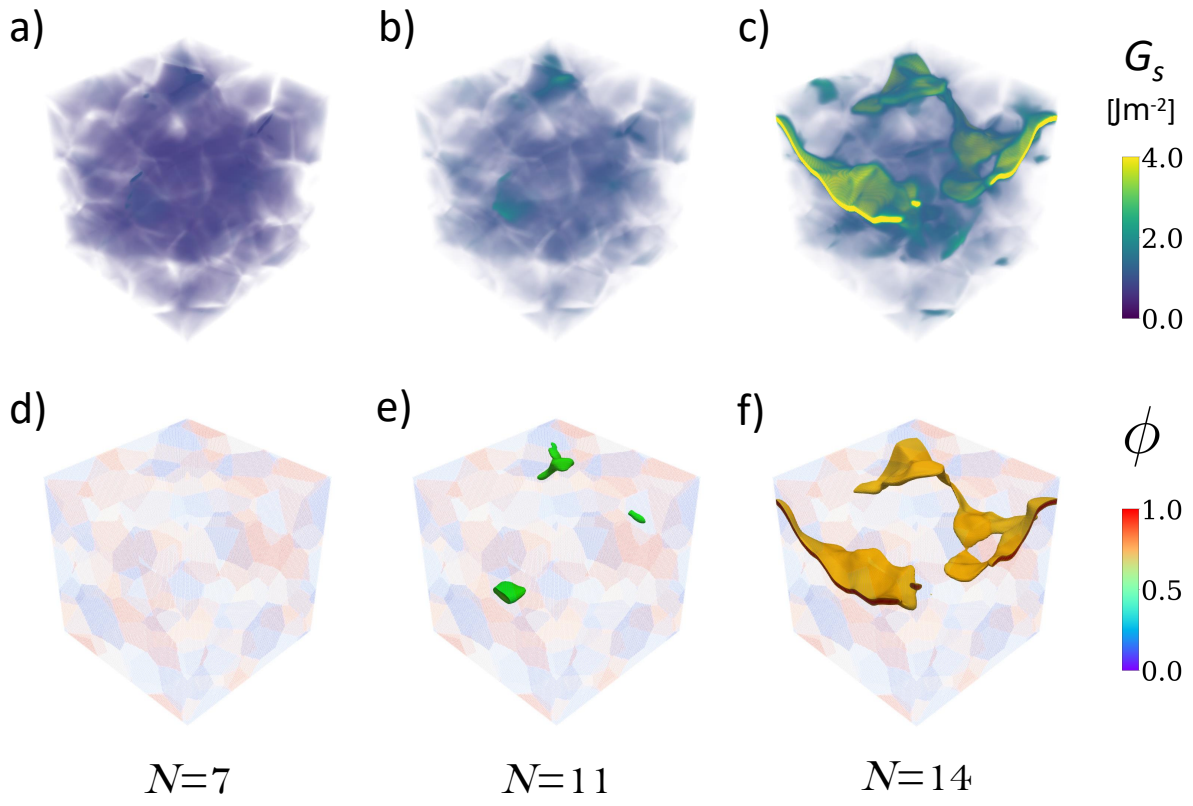

图 7：三维多晶体中的裂纹形核与扩展：储存能量密度预测结果 G_s（上）以及由相场等值线描述的裂纹轨迹（下）。结果以循环次数 N为函数展示。为便于观察，仅显示高于特定阈值的相场等值线；子图 (e) 中阈值为 0.5，子图 (f) 中为 0.8。

才能触发微观组织损伤。随后，疲劳损伤迅速扩展，经过14次循环后可观察到多条裂纹。该模型恰当地捕捉了塑性局部化与微观组织开裂之间的相互作用。在裂纹形核之前，储存能量密度参数在晶粒内的滑移面上不断积累；与二维多晶案例研究类似，几何必需位错对阻止裂纹在晶界处形核具有显著作用（见图7b）。从最初几次循环起即可检测到形核位置（见图7a和图7b），因为这些位置对应于储存能量密度参数最高的区域。损伤始于三个位置（见图7e），由此形成三条裂纹，随后裂纹继续扩展并相互作用。同样，与前一个案例研究一致，裂纹形核位置位于施密德因子较高的晶体内部。

结果表明，开裂趋势与微观组织塑性局部化现象密切相关。研究发现，裂纹形核沿晶体学平面发生，随后扩

展则遵循穿晶开裂机制，贯穿整个微观结构。观察到的扩展趋势有两种：一种是沿单个平面扩展的单滑移模式；另一种是两个方向相互竞争的多滑移模式，这种模式在先前的二维分析中也有所观察。在最后几个循环中，主裂纹和次生裂纹因彼此距离较近而合并（见图 7f），最终形成了与实验中观察到的相似裂纹形态 [70]。最终，多个微观结构裂纹相互作用，断裂变得不稳定。结果表明，该模型能够捕捉多个裂纹同时形核，以及裂纹分叉和多个裂纹合并等复杂开裂现象。此外，本案例研究展现了该框架处理大规模三维问题的能力，而这类问题采用传统有限元方法处理时可能难以实现。不过需要注意的是，FFT 求解器可能存在可扩展性问题，或受到高相对比度的限制。

4.5. 带自由表面的带缺口试样中从微观到宏观结构的裂纹扩展

最后，我们考察在非周期性边值问题中，裂纹从类缺口缺陷处扩展的情况，其中主裂纹沿多个晶粒扩展。研究旨在观察这样一种转变：当裂纹相对于相关微观结构长度尺度足够大时，微观力学开裂行为（主要受塑性局部化和各向异性支配）会转变为宏观I型裂纹扩展。为此，考虑尺寸为 $200\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m} \times 0.78\ \mu\text{m}$ 的样品，并将其离散为 $256 \times 128 \times 1$ 个体素。如图8a所示，通过加入体素缓冲层，在区域两侧设置两个自由表面。此外，在左侧边缘引入一个小缺口，以有效促进裂纹形核，并使裂纹仅沿一个方向扩展。对于自由表面缓冲层和缺口区域，均设定其刚度比原始晶体刚度低 10^{-5} 倍。需要指出的是，自由表面的处理不适用于标准 FFT 方法；为使克雷洛夫求解器收敛，此处需要将容差值提高至$tol_{lin} = 10^{-3}$ 。所采用的微观结构和晶粒尺寸经过选择，以确保试样宽度跨越10个晶粒。为此，需要略微减小晶粒尺寸，同时保持体素和相场长度尺度的量级不变。除载荷幅值设为 $\varepsilon_{max} = 1\%$、临界储能参数设为$G_{crit} = 2\ \text{J}\text{m}^{-2}$外，材料参数和加载条件均与先前的案例研究相同。所得结果如图8所示，包括裂纹轨迹（移除 $\phi > 0.9$ 的区域）以及采用边缘公式计算的 da/dN 与 ΔK 行为

半无限体中的裂纹。

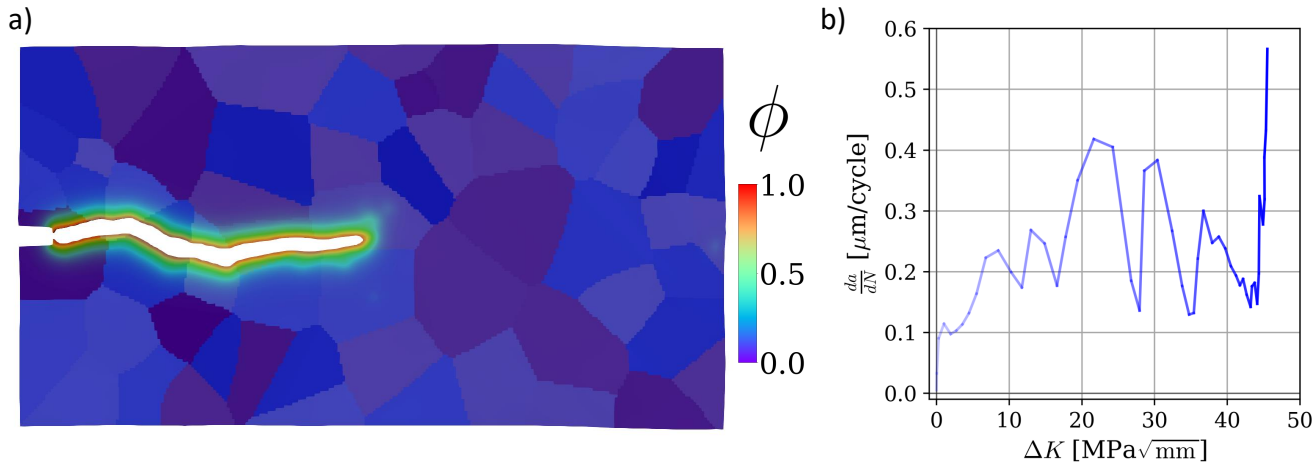

图8：带缺口试样中的微观至宏观裂纹扩展：(a) 裂纹扩展结果（ϕ 等值线，去除 $\phi > 0.9$ 区域，尺度变形因子为5），以及 (b) 疲劳裂纹扩展速率 da/dN 与应力强度因子幅值 ΔK的关系。

计算结果表明，裂纹仅需4个循环次数便会在预先存在的缺口尖端形核，但随后还需45个循环次数才能跨越多个晶粒扩展。起初，裂纹轨迹受晶面影响；随着裂纹尺寸增大，其对微观结构的敏感性似乎逐渐减弱，轨迹也越来越接近宏观I型扩展路径。在疲劳损伤的早期阶段，通常可观察到从II型或混合型向I型断裂的转变 [71]。图8b所示的裂纹扩展速率起初会发生振荡，这是由于裂纹穿过晶界时的裂纹扩展速度相对于其在晶体内部扩展时发生变化所致；随后，受应变控制加载条件影响，扩展速率逐渐降低。这些由穿晶开裂导致的振荡与基于微塑性的理论疲劳模型的预测一致 [72]。

5. 结论

本研究提出了一种基于微观结构的相场疲劳框架，可捕捉多晶材料中疲劳裂纹的形核与扩展。该模型的理论要素结合了基于位错的晶体塑性、损伤演化的相场描述，以及一种基于储能密度概念的新型断裂驱动力。研究表明，这一定义的驱动力纳入了微观结构信息，能够恰当地捕捉

塑性局部化现象。数值实现采用基于快速傅里叶变换的求解器，从而能够模拟经历多个加载循环且规模足够大的代表性体积单元。研究考察了五个案例，以深入了解该模型捕捉单晶、双晶以及二维和三维多晶体中疲劳裂纹形核与扩展的能力。这些数值实验经过精心设计，用以评估相关的微观结构塑性-断裂相互作用。主要发现如下：

- 模型预测表明，沿晶体学平面形成的滑移带会显著影响短疲劳裂纹扩展路径。裂纹既会沿单一晶体学平面扩展，也会因多个滑移面的影响而表现出混合模式行为。

- 观察发现，裂纹形核发生在具有优先取向的滑移面上。此外，考虑几何必需位错效应后，晶界处的裂纹形核会受到抑制；位错强化会阻碍晶界处的塑性局部化。

- 根据晶界取向的不同，裂纹可能轻易穿过晶界扩展，也可能发生偏转并沿晶界扩展。当晶界相对于初始裂纹倾斜时，后一种情况更为常见；而当裂纹垂直于晶界时，则更常见前一种情况。 45°

- 多晶体分析表明，裂纹会在施密德因子较高的晶粒中形成，随后沿晶体学平面路径发生穿晶裂纹扩展。

- 通过结合高效的快速傅里叶变换方法与相场断裂，该模型能够预测复杂的开裂现象，例如裂纹分叉，以及多个裂纹的形核及其相互作用；这些现象发生在相关的三维代表性体积单元中，并跨越多个加载循环次数。

- 边缘裂纹试样的模拟表明，随着裂纹长度相对于相关微观结构尺度增大，微观结构的影响会逐渐减弱。此外，该模型能够捕捉裂纹与晶界相互作用所导致的疲劳裂纹扩展速率波动。

致谢

Sergio Lucarini 感谢欧盟“地平线2020年研究与创新框架计划”通过项目 SIMCOFAT（资助协议编号：101031287）提供的玛丽·斯克沃多夫斯卡-居里个人欧洲奖学金资助。Emilio Mart´ınez-Pa˜neda 感谢英国研究与创新署未来领袖奖学金计划 [提供的资助，项目编号为 MR/V024124/1]。

参考文献

[1] S. Suresh，《材料疲劳》，剑桥固体科学，剑桥大学出版社，1998年。[2] A. Golahmar, C. F. Niordson, E. Mart´ınez-Pa˜neda，相场模型在高周疲劳中的应用：全寿命分析，《International Journal of Fatigue》170（2023年）107558。[3] O. Aslan, S. Quilici, S. Forest，基于微损伤理论的单晶疲劳裂纹扩展数值建模，《国际损伤力学杂志》20（5）（2011年）681–705。[4] J. Schijve，《结构与材料疲劳》，施普林格·多德雷赫特，2009年。[5] H. Ghonem，高温钛合金的微观结构与疲劳裂纹扩展机制，《International Journal of Fatigue》32（9）（2010年）1448–1460。

[6] D. McDowell、F. Dunne，《微观结构敏感型疲劳裂纹形成计算建模》，International Journal of Fatigue 32 (9) (2010) 1521–1542。

[7] J. Segurado、R. A. Lebensohn、J. LLorca，第一章——多晶体的计算均匀化，载于：M. I. Hussein（编），晶体与弹性超材料进展，第1部分，《应用力学进展》第51卷，Elsevier，2018年，第1–114页。

[8] C. Sweeney、W. Vorster、S. Leen、E. Sakurada、P. McHugh、F. Dunne，弹性各向异性、长度尺度和晶体学滑移在疲劳裂纹形核中的作用，《固体力学与物理学杂志》61 (5) (2013) 1224–1240。

[9]G. M. Castelluccio, W. D. Musinski, D. L. McDowell，《多晶体微观结构敏感性早期疲劳评估的最新进展》，《固态与材料科学新观点》18 (4) (2014) 180–187。

[10] A. Rovinelli, Y. Guilhem, H. Proudhon, R. A. Lebensohn, W. Ludwig, M. D. Sangid, 《通过概率框架评估小裂纹扩展疲劳指标参数的可靠性》, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 25 (4) (2017) 045010。[11] D. J. Long, W. Wan, F. P. Dunne, 《微观结构对锆合金-4中短疲劳裂纹扩展速率的影响：晶体塑性建模与实验》, International Journal of Fatigue 167 (2023) 107385。[12] Y. Xu, W. Wan, F. P. Dunne, 《微观结构断裂力学：疲劳裂纹处的储存能量密度》, 《固体力学与物理学杂志》146 (2021) 104209。[13] S. Lucarini, J. Segurado, 《基于微观力学的疲劳建模中谱求解器的精度》, 《计算力学》63 (2) (2019) 365–382。[14] H. Proudhon, J. Li, F. Wang, A. Roos, V. Chiaruttini, S. Forest, 《采用有限元晶体塑性和重新网格划分进行短疲劳裂纹扩展的三维模拟》, International Journal of Fatigue 82 (2016) 238–246。[15] D. Wilson, W. Wan, F. P. Dunne, 《六方密排、体心立方晶体和面心立方多晶体中的微观结构敏感性疲劳裂纹扩展》, 《固体力学与物理学杂志》126 (2019) 204–225。[16] N. Grilli, A. C. F. Cocks, E. Tarleton, 《孪晶界处裂纹的形核与扩展建模》, 《国际断裂力学杂志》233 (1) (2022) 17–38。[17] B. Bourdin, G. A. Francfort, J.-J. Marigo, 《断裂变分方法》, 《弹性学杂志》91 (1) (2008) 5–148。[18] H. Amor, J.-J. Marigo, C. Maurini, 《含单边接触的脆性断裂变分方法的正则化表述：数值实验》, 《固体力学与物理学杂志》57 (8) (2009) 1209–1229。[19] P. K. Kristensen, C. F. Niordson, E. Martˊınez-Paˆneda, 《相场断裂评估：裂纹萌生与扩展》, 《英国皇家学会哲学汇刊A辑：数学、物理与工程科学》379 (2021) 20210021。

[20] L. D. Lorenzis, C. Maurini, 《变分相场模型中多轴载荷下脆性断裂的形核》, 《国际断裂力学杂志》237 (2022年) 61–81。

[21] Y. Navidtehrani, C. Beteg´on, E. Mart´ınez-Pa˜neda, 《相场断裂驱动力分解的一般框架，特别适用于Drucker–Prager失效面》，Theoretical and Applied Fracture Mechanics 121 (2022年) 103555。[22] J.-Y. Wu, Y. Huang, V. P. Nguyen, 《固体中I型 + II / III型失效的三维相场建模》，《计算机方法：应用力学与工程》373 (2021年) 113537。[23] W. Tan, E. Mart´ınez-Pa˜neda, 《纤维增强复合材料微观断裂与R曲线行为的相场预测》，《复合材料科学与技术》202 (2021年) 108539。[24] M. J. Borden, C. V. Verhoosel, M. A. Scott, T. J. Hughes, C. M. Landis, 《动态脆性断裂的相场描述》，《计算机方法：应用力学与工程》217-220 (2012年) 77–95。[25] P. K. Kristensen, C. F. Niordson, E. Mart´ınez-Pa˜neda, 《相场断裂在氢辅助失效建模中的应用》，Theoretical and Applied Fracture Mechanics 110 (2020年) 102837。[26] A. J. Pons, A. Karma, 《混合型断裂中的螺旋状裂纹前沿失稳》，Nature 464 (7285) (2010) 85–89。[27] M. Ambati, T. Gerasimov, L. De Lorenzis, 《延性断裂的相场建模》，《计算力学》55 (5) (2015) 1017–1040。[28] R. Alessi, J.-J. Marigo, C. Maurini, S. Vidoli, 《耦合损伤与塑性以对脆性、黏聚和延性断裂进行相场正则化：一维示例》，《国际机械科学杂志》149 (2018) 559–576。[29] F. Aldakheel, N. Noii, T. Wick, O. Allix, P. Wriggers, 《自适应延性相场断裂的多层次全局–局部技术》，《计算机方法：应用力学与工程》387 (2021年) 114175。[30] S. S. Shishvan, S. Assadpour-asl, E. Mart´ınez-Pa˜neda, 《金属断裂的基于机制的梯度损伤模型》，《工程断裂力学》255 (2021年) 107927。[31] Y.-S. Lo, M. J. Borden, K. Ravi-Chandar, C. M. Landis, 《疲劳裂纹扩展的相场模型》，《固体力学与物理学杂志》132 (2019年) 103684。[32] P. Carrara, M. Ambati, R. Alessi, L. De Lorenzis, 《基于变分相场方法的脆性材料疲劳行为建模框架》，《计算机方法：应用力学与工程》361 (2020年) 112731。

[33] M. M. Hasan, T. Baxevanis, 《脆性材料低周疲劳的相场模型》, International Journal of Fatigue 150 (2021年) 106297。[34] A. Golahmar, P. K. Kristensen, C. F. Niordson, E. Mart´ınez-Pa˜neda, 《氢辅助疲劳的相场模型》, International Journal of Fatigue 154 (2022年) 106521。[35] E. Mart´ınez-Pa˜neda, A. Golahmar, C. F. Niordson, 《氢辅助开裂的相场公式》, 《计算机方法: 应用力学与工程》342 (2018年) 742–761。[36] A. M. Boyce, E. Mart´ınez-Pa˜neda, A. Wade, Y. S. Zhang, J. J. Bailey, T. M. Heenan, P. R. Brett, Dan J. L., Shearing, 《通过X射线计算机断层扫描和建模预测锂离子电池电极的开裂》, Journal of Power Sources 526 (2022年) 231119。[37] W. Ai, B. Wu, E. Mart´ınez-Pa˜neda, 《用于锂离子电池电极颗粒疲劳开裂建模的多物理场相场公式》, Journal of Power Sources 544 (2022年) 231805。[38] S. Rezaei, J. N. Okoe-Amon, C. A. Varkey, A. Asheri, H. Ruan, B. X. Xu, 《化学-力学环境下的内聚相场断裂模型：电池材料退化研究》, Theoretical and Applied Fracture Mechanics 124 (2023年) 103758。[39]M. Diehl, M. Wicke, P. Shanthraj, F. Roters, A. Brueckner-Foit, D. Raabe, 《晶体塑性–相场断裂耦合模拟研究空洞周围的损伤演化：孔隙形状与晶体学取向》, JOM 69 (5) (2017年) 872–878。[40] T.-T. Nguyen, J. R´ethor´e, J. Yvonnet, M.-C. Baietto, 《多晶材料各向异性裂纹扩展的多相场建模》, 《计算力学》60 (2) (2017年) 289–314。[41] A. Emdadi, M. Asle Zaeem, 《多晶材料中的裂纹扩展相场建模》, Computational Materials Science 186 (2021年) 110057。[42] M. Boeff, H. u. Hassan, A. Hartmaier, 《多晶体疲劳裂纹萌生的微观力学建模》, Journal of Materials Research 32 (23) (2017年) 4375–4386。[43] R. A. Lebensohn, A. K. Kanjarla, P. Eisenlohr, 《基于快速傅里叶变换的弹黏塑性公式，用于预测多晶材料中的微观力学场》, International Journal of Plasticity 32-33 (2012年) 59–69。[44] S. Lucarini, M. V. Upadhyay, J. Segurado, 《微观力学中的FFT方法：基础、方法与应用》, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 30 (2) (2022年) 023002。

[45] Y. Chen, D. Vasiukov, L. G´el´ebart, C. H. Park, 《用于脆性断裂变分相场建模的FFT求解器》, 《计算机方法：应用力学与工程》349 (2019年) 167–190。[46] R. Ma, W. Sun, 《应用于强各向异性脆性材料的高阶和多相场断裂模型FFT求解器》, 《计算机方法：应用力学与工程》362 (2020年) 112781。[47] F. Xue, T.-L. Cheng, Y. Lei, Y.-H. Wen, 《具有约束条件的相场框架及其在多晶体延性断裂与疲劳中的应用》, npj Computational Materials 8 (1) (2022年) 18。[48] F. Dunne, D. Rugg, A. Walker, 《长度尺度相关、弹性各向异性且基于物理的六方密排晶体塑性：在钛合金冷停留疲劳中的应用》, International Journal of Plasticity 23 (6) (2007) 1061–1083。[49] F. P. E. Dunne, R. Kiwanuka, A. J. Wilkinson, 《微变形、晶格旋转和几何必需位错密度的晶体塑性分析》, 《英国皇家学会会刊 A 辑：数学、物理与工程科学》468 (2145) (2012年) 2509–2531。[50] M. F. Ashby, 《塑性非均质材料的变形》, 《哲学杂志》21 (170) (1970) 399–424。[51] N. A. Fleck, J. R. Willis, 《应变梯度塑性：能量型还是耗散型？》, 《力学学报》31 (4) (2015年) 465–472。[52] E. Mart´ınez-Pa˜neda, V. S. Deshpande, C. F. Niordson, N. A. Fleck, 《塑性应变梯度对金属裂纹扩展阻力的作用》, 《固体力学与物理学杂志》126 (2019年) 136–150。[53] J. Nye, 《含位错晶体中的一些几何关系》, 《冶金学报》1 (2) (1953年) 153–162。[54] J. Cheng, S. Ghosh, 《用于描述镁合金孪晶形核变形的晶体塑性有限元模型》, International Journal of Plasticity 67 (2015) 148–170。[55] A. A. Griffith, 《固体中的断裂与流动现象》, 《哲学汇刊 A 辑》221 (1921) 163–198。[56] C. Kuhn, R. M¨uller, 《用于断裂的连续介质相场模型》, 《工程断裂力学》77 (18) (2010年) 3625–3634。

[57] C. Miehe，L.-M. Sch¨anzel，H. Ulmer， 多物理场问题中的断裂相场建模。第一部分：热弹性固体中脆性裂纹扩展的裂纹表面平衡与失效准则，《计算机方法：应用力学与工程》294（2015年）449–485。[58] B. Chen，J. Jiang，F. P. Dunne，储存能量密度是疲劳裂纹萌生的主要介观尺度机制驱动因素吗？International Journal of Plasticity 101（2018年）213–229。[59] C. Miehe，F. Aldakheel，A. Raina，有限应变下的延性断裂相场建模：一种变分梯度扩展塑性损伤理论，International J ournal of Plasticity 84（2016年）1–32。[60] M. Ambati，T. Gerasimov，L. De Lorenzis，脆性断裂相场模型综述及一种新的快速混合公式，《计算力学》55（2）（2015年）383–405。[61] S. Lucarini，J. Segurado，Dbfft：一种用于力学行为非线性均匀化的基于位移的快速傅里叶变换方法，《国际工程科学期刊》144（2019年）103131。[62] S. Haouala，S. Lucarini，J. LLorca，J. Segurado，利用应变梯度晶体塑性和快速傅里叶变换均匀化模拟面心立方多晶体中的霍尔–佩奇效应，《固体力学与物理学杂志》134（2020年）103755。[63] M. Magri，L. Adam，J. Segurado，延性复合材料中的粒径效应：一项快速傅里叶变换均匀化研究，《固体力学与物理学杂志》160（2022年）104759。[64] F. Willot，用于精确计算具有准确局部场的复合材料力学响应的基于傅里叶变换的方案，Comptes Rendus M´ écanique 343（3）（2015年）232–245。[65] M. Ladeck´ý，R. J. Leute，A. Falsafi，I. Pultarov´a，L. Pastewka，T. Junge，J. Zeman，一种用于均匀化的最优预条件快速傅里叶变换加速有限元求解器，《应用数学与计算》446（2023年）127835。[66] B. Chen，J. Jiang，F. P. Dunne，镍基单晶和少晶中的微观组织敏感疲劳裂纹萌生，《固体力学与物理学杂志》106（2017年）15–33。[67] J. C. Stinville，M. A. Charpagne，A. Cervellon，S. Hemery，F. Wang，P. G. Callahan，V. Valle，T. M. Pollock，晶体金属材料疲劳强度的起源，《科学》377（6610）（2022年）1065–1071。

[68] S. Rabbolini，G. J. Pataky，H. Sehitoglu，S. Beretta，Haynes 230单晶中的疲劳裂纹扩展：基于数字图像相关的分析，《工程材料与结构的疲劳与断裂》38（5）（2015年）583–596。

[69] V. Karamitros、D. W. MacLachlan、F. P. Dunne，镍基高温合金单晶中的机理疲劳：裂纹路径与扩展速率研究，《固体力学与物理学杂志》158（2022年）104663。

[70] A. Rovinelli、M. D. Sangid、H. Proudhon、Y. Guilhem、R. A. Lebensohn、W. Ludwig，通过多模态数据和贝叶斯网络预测小裂纹的三维疲劳裂纹扩展速率：原位实验与晶体塑性模拟，《固体力学与物理学杂志》115（2018年）208–229。

[71] B. K¨unkler、O. D¨uber、P. K¨oster、U. Krupp、C.-P. Fritzen、H.-J. Christ，短裂纹扩展建模——从I阶段到II阶段的转变，《工程断裂力学》75（3）（2008年）715–725。

[72] P. Chowdhury、H. Sehitoglu，《疲劳裂纹扩展机制——理论发展批判性综述》，《Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures》39（6）（2016年）652–674。