

DOI: 10.7511/jslx20240722002

增材铜合金拉伸力学行为的卷积神经网络预测

肖庆晖¹, 张仁嘉², 刘士杰³, 胡文轩¹, 吕晨曦¹,
朱思瑛¹, 易敏^{*1}

(1. 南京航空航天大学 航空航天结构力学及控制全国重点实验室, 南京 210016;

2. 北京宇航系统工程研究所, 北京 100076; 3. 北京航天动力研究所 低温液体推进技术实验室, 北京 100076)

摘要:深度学习因其在处理复杂数据和解决复杂问题方面的显著优势而备受关注,已应用于材料性能预测领域。本文提出了一种结合卷积神经网络模型与晶体塑性有限元方法的预测框架,在晶体塑性模型中考虑了增材铜合金(CuCrZr)固溶强化、位错强化以及晶界强化的贡献,实现了基于增材铜合金的晶体学结构极图、微结构图和晶粒尺寸预测单轴拉伸力学行为的目标。首先,基于实验结果对晶体塑性模型参数进行校正,验证了模型的准确性及预测能力。随后,使用参数校正后的晶体塑性模型对增材铜合金不同的代表体积元进行了一系列的有限元模拟,并利用这些模拟结果对卷积神经网络模型进行了训练、验证与测试。研究表明,该卷积神经网络模型在保证预测精度的同时,显著减少了计算时间,展示了其在增材铜合金力学性能预测方面的应用前景。

关键词:增材制造;卷积神经网络;晶体塑性;铜合金

中图分类号:V256;O302

文献标志码:A

文章编号:1007-4708(2024)05-0843-08

1 引言

增材制造 AM (Additive Manufacturing) 技术,又称 3D 打印技术,是一种通过逐层叠加材料来制造复杂三维结构的先进制造工艺^[1]。与传统的减材制造相比,增材制造具有设计自由度大、材料利用率高和制造周期短等显著优点^[2]。近年来,随着科技的进步和制造需求的多样化,增材制造技术在航空航天、生物医疗和汽车制造等领域得到了广泛应用^[3]。特别是在高性能金属材料的制造中,增材制造展示出其独特的优势和广阔的应用前景^[4]。

许多金属材料,如不锈钢、钛合金、镍合金、铝合金和铜合金等,已广泛用于增材制造产品中^[5-10]。由于铜合金具有优异的导电性、导热性和耐腐蚀性能以及较高的强度和硬度,在工业上得到了广泛的应用^[11]。在航空航天领域,铜合金广泛用于制造火箭发动机的关键部件,如燃烧室、喷嘴、热交换器以及高强度结构部件等^[12]。然而,在增材制造过

程中,快速加热/冷却和层间重熔形成了复杂的微观组织结构,且其力学性能不仅受到工艺参数(如激光功率、扫描速度和层厚等)的影响,还与材料的微观结构和缺陷密切相关^[13-15]。因此,增材制造铜合金力学行为的预测也极具挑战。

现阶段,结合力学理论的有限元方法在材料力学性能预测方面发挥着重要作用。如通过晶体塑性有限元方法 CPFEM (Crystal Plasticity Finite Element Method) 可以预测金属材料的拉伸、疲劳及断裂等力学行为^[16,17];通过疲劳相场断裂模型可以对金属材料的疲劳裂纹全寿命进行预测^[18,19]。然而,经典的有限元方法在计算复杂微观结构和多尺度多物理场耦合的问题时存在计算成本高、本构模型依赖性强和网格敏感性等问题。

近年来,深度学习作为人工智能领域的前沿技术,因其在处理复杂数据和解决复杂问题方面的显著优势而备受关注^[20-22]。如基于人工神经网络成功预测了材料的应力-应变曲线和微观结构演化^[23,24]。此外,Yamanaka 等^[25]利用深度神经网络

收稿日期:2024-07-22; 修改稿收到日期:2024-08-13.

基金项目:国家重点研发计划青年科学家项目(2022YFB4600700);国家科技重大专项(J2019-IV-0014-0082);国家青年人才项目资助.

作者简介:易敏*(1987-),男,博士,教授(E-mail:yimin@nuaa.edu.cn).

引用本文:肖庆晖,张仁嘉,刘士杰,等.增材铜合金拉伸力学行为的卷积神经网络预测[J].计算力学学报,2024,41(5):843-850.

XIAO Qing-hui, ZHANG Ren-jia, LIU Shi-jie, et al. Predicting tensile behavior of additively manufactured copper alloys by convolutional neural network[J]. Chinese Journal of Computational Mechanics, 2024, 41(5): 843-850.

络预测了金属板材的双轴应力-应变曲线。而卷积神经网络(CNN)也在复合材料应力-应变曲线预测中展现了优异的性能^[26,27]。

本文提出了一种结合 CNN 与 CPFEM 的预测框架,成功预测了增材制造铜合金(CuCrZr)的单轴拉伸力学行为。为确保数据集的准确性和可靠性,本文首先通过 CPFEM 模拟获取数据,并与实验结果进行了对比验证。利用 CNN 对增材制造铜合金拉伸力学行为进行预测,不仅显著提高了计算效率,还揭示了材料微观结构特征与力学性能之间的内在联系,为增材制造铜合金的力学性能设计和优化提供了新的思路与方法。

2 增材铜合金晶体塑性模型

材料在发生变形时,总应变梯度 \mathbf{F} 可以乘法分解为由晶体滑移引起的塑性变形 \mathbf{F}_p 和由晶格畸变引起的弹性变形 \mathbf{F}_e , 即^[28]

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p \quad (1)$$

在晶体塑性模型中,认为塑性变形由位错滑移引起,因此在中间构型上的塑性速度梯度 \mathbf{L}_p 定义为

$$\mathbf{L}_p = \dot{\mathbf{F}}_p \mathbf{F}_p^{-1} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{slip}}} \dot{\gamma}^{\alpha} \mathbf{m}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_0^{\alpha} \quad (2)$$

式中 \mathbf{m}_0^{α} 与 \mathbf{n}_0^{α} 分别为变形前第 α 个滑移系上的滑移方向向量和滑移面法向向量(均为单位向量)。

在率相关公式中,所有滑移系只在超过阈值以上的应力作用下激活,并且流动准则将剪切速率与分切应力和微观结构的当前状态联系起来,即^[29]

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \dot{\gamma}_0 \langle |\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}| / g^{\alpha} \rangle^{1/m} \text{sign}(\tau^{\alpha} - \chi^{\alpha}) \quad (3)$$

式中 $\dot{\gamma}_0$ 为参考滑移率。 $\langle \cdot \rangle$ 为 Macauley 括号,其定义为当 $x < 0$ 时, $\langle x \rangle = 0$; 当 $x > 0$ 时, $\langle x \rangle = x$ 。 χ^{α} 为背应力,初始值一般为 0。 g^{α} 为滑移阻力。应变率敏感性指数 $1/m$ 控制流动行为的率相关敏感性,当 $1/m \rightarrow 0$ 时,可以近似认为材料的流动行为率无关。 τ^{α} 为分切应力,在初始构型下的表达式可以近似为^[30]

$$\tau^{\alpha} = \mathbf{S} : \mathbf{m}_0^{\alpha} \otimes \mathbf{n}_0^{\alpha} \quad (4)$$

式中 \mathbf{S} 为第二类 Piola-Kirchhoff 应力张量。

增材制造铜合金的滑移阻力 g^{α} 由多个强化机制的贡献组成且由式(5)确定^[31]

$$g^{\alpha} = \tau_c^{\alpha} + \tau_{ds}^{\alpha} + \tau_{gs}^{\alpha} + \tau_{ss}^{\alpha} \quad (5)$$

式中 τ_c^{α} 为临界分切应力,代表位错运动的晶格摩擦阻力或滑移面间摩擦力,对应着材料的屈服强度; τ_{ds}^{α} 为位错强化的贡献, τ_{gs}^{α} 为晶粒尺寸细化的

贡献,体现为晶界强化; τ_{ss}^{α} 为固溶强化的贡献。对于上述四种强化贡献,本文在唯象晶体塑性模型框架内简化处理,只考虑临界分切应力 τ_c^{α} 随滑移率 $\dot{\gamma}^{\alpha}$ 演化,不显式考虑位错密度演化及固溶相演化,而是通过调整模型参数使材料强化阶段的等效力学行为与实验结果吻合。

由于林位错的作用,位错强化机制的贡献可估算为^[31]

$$\tau_{ds}^{\alpha} = c_1 M G b \sqrt{\rho_0} \quad (6)$$

式中 ρ_0 为位错密度,可以通过 KAM 方法对增材制造铜合金试样进行测量; M, G 和 b 分别为泰勒因子、剪切模量和 Burgers 矢量的模, c_1 为模型拟合参数。

晶粒尺寸对屈服强度的贡献由 Hall-Petch 关系表示,即^[32]

$$\tau_{gs}^{\alpha} = k / \sqrt{d} \quad (7)$$

式中 k 为 Hall-Petch 系数, d 为代表体积元 RVE (Representative Volume Element) 中每个晶粒的尺寸。

在增材制造铜合金中,Cu 基体中保持在固溶态的元素会诱导晶格畸变,进而影响位错运动,导致合金的强化效应,固溶强化对屈服强度的贡献可表示为^[33]

$$\tau_{ss}^{\alpha} = M G \epsilon^{3/2} \sqrt{x_a} / 3 \quad (8)$$

式中 x_a 为 Cr 元素在固溶体中的质量浓度, ϵ 为晶格失配相关的参数。由于锆(Zr)、氧(O)、硅(Si)和铁(Fe)在铜(Cu)基体中的含量较低且溶解度较小,因此忽略其强化贡献。

此外,背应力演化服从 Armstrong-Frederick 直接硬化与动态恢复关系,其表达式为^[34]

$$\dot{\chi}^{\alpha} = h \dot{\gamma}^{\alpha} - h_D \chi^{\alpha} |\dot{\gamma}^{\alpha}| \quad (9)$$

式中 h 为直接硬化系数, h_D 为动态恢复系数。对于临界分切应力,演化方程为^[30]

$$\dot{\tau}_c^{\alpha} = \sum_{\beta=1}^{N_{\text{slip}}} h_{\alpha\beta} |\dot{\gamma}^{\beta}| \quad (10)$$

$$h_{\alpha\beta} = q_{\alpha\beta} [h_0 (1 - \tau_c^{\alpha} / \tau_s^{\alpha})^a] \quad (11)$$

式中 $q_{\alpha\beta}$ 为滑移系交互系数, h_0 为硬化模量, τ_s^{α} 为饱和滑移阻力, a 为硬化系数。

3 卷积神经网络模型

3.1 卷积神经网络简介

CNN 是一种深度学习模型,适用于处理图像数据。其具有独特的层次结构,能够自动学习图像的特征,并通过参数共享和局部连接的方式大幅减

少模型参数,从而提高计算效率和泛化能力。首先,卷积层通过卷积核对图像进行局部扫描,提取特征;其次,池化层通过下采样减少特征图的尺寸,保留重要特征,减少计算量;最后,全连接层结合所有提取的特征进行分类或回归。CNN广泛应用于图像分类、目标检测和图像分割等任务,显著提升了计算机视觉的性能的多层次特征,从而在处理复杂任务时表现出色。

3.2 卷积神经网络架构

本文搭建了一种用于预测材料应力-应变曲线的CNN架构,可以利用增材制造微观结构的全局和局部特征来预测材料的力学性能。该网络由输入(Input)、卷积操作部分(Convolution operation)、展平部分(Flatten)、全连接层部分(Fully connected network)以及输出(Output)组成,如图1所示。卷积操作部分是卷积神经网络的核心,通过一组可学习的卷积核对输入图像进行局部感

知,提取特征。卷积操作的结果是特征图(Feature map),每个卷积核生成一个特征图。为了增强非线性,通常在卷积操作后应用ReLU激活函数。在图1中每个卷积层都采用了 3×3 的卷积核,后接ReLU激活函数,即每经过图中蓝色箭头则进行这样一次操作,可以将图像尺寸减小,同时可以改变输入和输出通道数的大小。池化层是用于对特征图进行下采样,减少数据维度和计算量。最大池化(Max pooling)是常用的池化方法,通过选择局部区域内的最大值作为输出,保留显著特征。在图1卷积层后面紧跟着一个 2×2 的最大池化层,即每经过图中红色箭头进行这样一次操作,可以将图像尺寸减半,通道数保持不变。经过多层卷积和池化操作后,得到的高维特征图扁平化为一维向量,然后输入到全连接层。全连接层通过线性变换和非线性激活函数进行最终输出预测结果。

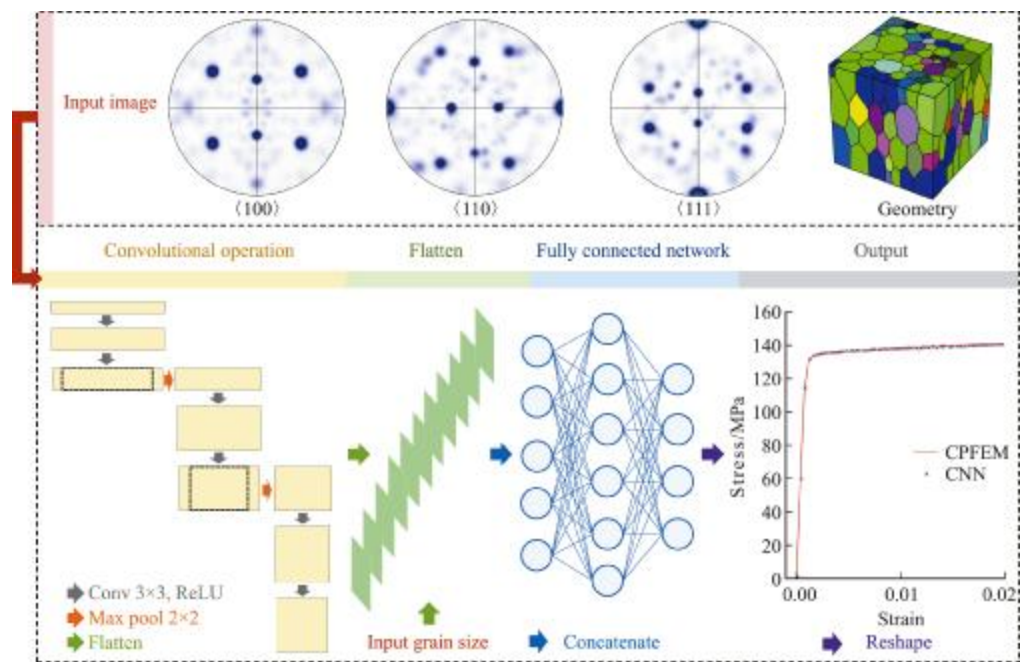


图1 用于预测增材铜合金应力-应变曲线的CNN架构

Fig. 1 CNN architecture for predicting stress-strain curves of AM copper alloy

3.3 数据集预处理与神经网络训练

晶体学织构对材料性能有重要影响。如材料中晶粒的取向可以影响材料的强度、塑性和疲劳性能等。晶体学织构通常通过分析材料中晶粒的取向分布来研究,一种常用极图(Pole figure)来描述晶粒的取向。极图是将晶体中各晶粒的取向投影到球面或平面上,显示选定晶面法线(极点)相对于晶粒参考坐标系方向的二维图像,其中 $\langle 100 \rangle$, $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 111 \rangle$ 三个方向作为面心立方晶体结构中

最重要的对称方向,能够较全面表征增材制造CuCrZr合金的晶体取向分布和织构特征。

此外,晶体微观结构对材料的力学性能有显著影响。微观结构包括晶粒的大小、形状、取向以及晶界的分布等,这些因素共同决定了材料在外力作用下的力学响应。如晶粒取向会影响滑移系的活化,从而导致材料在不同方向上表现出各向异性的力学性能;晶粒大小通过Hall-Petch效应对屈服强度产生影响,较小的晶粒通常会增加材料的强

度;晶粒数量及其分布影响着晶粒间的相互作用,从而改变材料的均匀性和整体力学性能。

在 CNN 模型中,三个方向的极图以及晶体微观结构平面图作为 CNN 的输入,如图 1 中输入图像(Input image)部分所示。除极图和微观结构图外,晶粒尺寸也是 CNN 的输入,晶粒尺寸以晶粒的等效直径(Equivalent diameter)表示,如图 1 中输入晶粒尺寸(Input grain size)部分所示。由于晶粒形状通常是不规则的,等效直径将不规则晶粒视作等效球体,用其直径表示晶粒尺寸。每个晶体所含的晶粒数量各异,晶粒尺寸也不同。等效直径形成的各晶粒尺寸为元素数目不等的一维数组,为便于统一处理,将晶粒尺寸分布统计为直方图。

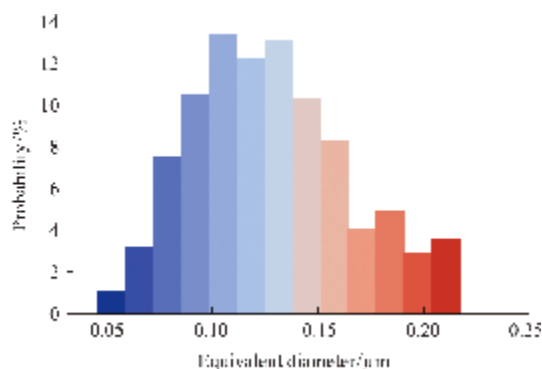


图2 晶粒尺寸分布

Fig. 2 Histogram of grain size distribution

本文将一个(8000,1)一维数组的晶粒尺寸数据通过等效直径方式处理成代表晶粒尺寸数据区间和落在其中的数据分布的一个(15,2)矩阵,其分布如图2所示,既能反映晶粒尺寸数据分布,又能方便网络架构进行统一处理。将经过卷积操作的图像输入以及晶粒尺寸分布的矩阵输入均进行展平操作,然后将两者连接(Concatenate)起来经全连接层后进行预测输出。

数据集中的应力和应变数据作为神经网络训练的标签数据,神经网络的损失函数计算网络输出和标签数据之间的误差(Loss)并反向传播,以实现 CNN 的学习过程。测试集中的应力、应变数据用于和训练好的 CNN 输出结果进行对比,以评估 CNN 模型的预测能力。

CNN 的数据集由训练集(Train)、验证集(Validation)和测试集(Test)组成。训练集是最大的数据集,用于模型的学习和参数优化。验证集与训练集相互独立,用于评估模型在未训练数据上的泛化能力。通过在验证集上进行验证,可以观察模型的过拟合或欠拟合情况,进而调整模型结构和超参数。测试集与模型训练过程无关,用于模拟模型

在真实应用中的表现。为避免影响最终的评估结果,在训练和验证阶段不使用测试集中的数据。三个数据集的数据来源与格式都完全相同,由原始数据集按比例划分得到。

本文共生成了 300 组数据集,涵盖了 12 种晶粒取向、5 种晶粒形貌及 5 种晶粒尺寸的排列组合。在数据集构建过程中,本文通过调整微观结构的参数来模拟不同的材料状态。如晶粒取向的变化通过设置随机取向或引入一定比例的织构(如(112)[11 $\bar{1}$]和($\bar{1}$ 12)[1 $\bar{1}$ 1])实现;改变晶粒沿 z 轴与沿 x/y 轴的长度比例,可实现不同的晶粒形貌;晶粒尺寸则在 $95 \mu\text{m} \sim 135 \mu\text{m}$ 变化。然后,按照 203:87:10 的比例,将数据集随机分为训练集、测试集和验证集。

在本文 CNN 模型中,输入数据涵盖了极图图像、晶粒几何形状图像以及晶粒尺寸等信息。尽管位错密度和固溶原子浓度也与材料强度密切相关,但由于这些信息的获取难度较大,且数据量不足以支撑 CNN 模型的有效训练,因此本文暂不将其作为输入考虑。本文聚焦于更易获取的晶粒信息,输出数据则为应力与应变数值。

4 结果与讨论

4.1 晶体塑性模型验证

图3为晶体塑性模型参数校正使用的 RVE 模型。需要注意的是,本文建立的 RVE 模型未考虑几何周期性,且在模拟过程中未施加周期性边界条件。根据文献[31]实验表征结果,RVE 模型的尺寸设为 $0.5 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm} \times 0.5 \text{ mm}$,模型中包含 111 个晶粒,晶粒取向随机。在模型的 x, y 和 z 方向上分别划分 25 个单元,总计 15625 个单元。模拟时,约束 RVE 模型上 x, y 和 z 轴负方向的位移,在 z 轴正方向施加随时间变化的位移载荷,应变率设置为 $2.5 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$ 。

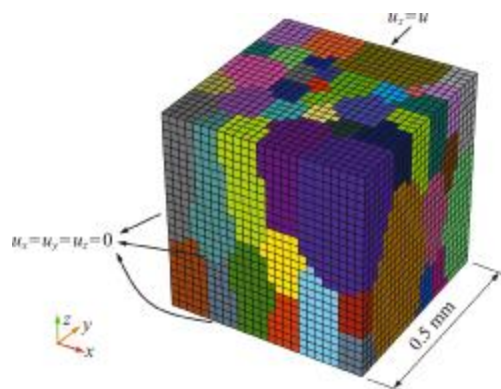


图3 RVE 模型的单轴拉伸边界条件

Fig. 3 Uniaxial tension boundary conditions for RVE model

晶体塑性模型参数列入表 1,其中大部分材料参数可以从文献中获得,拟合参数通过试错法确定。由于目前对增材 CuCrZr 合金的实验研究较为缺乏,因此本文标定的模型参数组合可能不唯一。图 4 为晶体塑性模型对增材制造 CuCrZr 合金的模拟结果,对比应力-应变曲线可以看出,模拟结果与实验结果^[31]吻合,证明了考虑固溶强化、位错强化以及晶粒尺寸的晶体塑性模型能够完整地再现增材制造 CuCrZr 合金的拉伸力学行为。

表 1 增材制造 CuCrZr 合金的晶体塑性模型参数
Tab. 1 Material parameters of crystal plasticity model for additively manufactured CuCrZr alloy

参数	符号	值	参考文献
弹性常数/GPa	C_{11}	168.4	[30]
	C_{12}	121.4	
	C_{44}	75.4	
参考滑移率/ s^{-1}	$\dot{\gamma}_0$	0.001	
应变率敏感参数	$1/m$	10	
直接硬化系数/MPa	h	36	
动态恢复系数	h_D	360	
初始临界分切应力/MPa	$(\tau_c^s)_{t=0}$	11.6	拟合
硬化模量/MPa	h_0	16.415	
滑移交互系数	$q_{\alpha\beta}$	1.4	
饱和滑移阻力/MPa	τ_s^s	109.8	[30]
硬化系数	a	2.5	
Hall-Petch 系数/ $MPa \cdot mm^{0.5}$	k	1.0164	拟合
模型参数	c_1	0.041	
泰勒因子	M	3.06	
剪切模量/GPa	G	45.5	
Burgers 矢量的模/nm	b	0.256	[31]
初始位错密度/ m^{-2}	ρ_0	5×10^{14}	
晶格失配参数	ϵ	0.0051	
Cr 元素质量浓度/wt%	x_a	0.78	

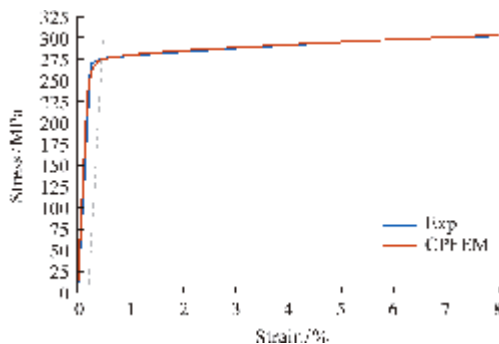


图 4 晶体塑性模型的模拟结果与实验结果^[31]对比
Fig. 4 Comparison of simulation result and experimental result by crystal plasticity model^[31]

4.2 应力-应变曲线的 CNN 预测

4.1 节的结果表明经过参数校正后,本文提出的晶体塑性模型能够准确复现实验的拉伸力学行

为。因此,这些经过验证的晶体塑性模拟结果可以用于 CNN 模型的训练、验证和测试。在本次应力-应变曲线预测任务中,为了优化模型输出结果,本文通过不断调整网络的超参数以提高预测精度。经过多次测试,最终确定的 CNN 训练参数为 Adam 优化器和学习率 0.0005。

如图 5 所示,CNN 模型在训练 200 个 Epoch 后,训练集和验证集上 Loss 损失函数逐步下降, Loss 值小于 10^{-4} ,可认为神经网络模型已经收敛。

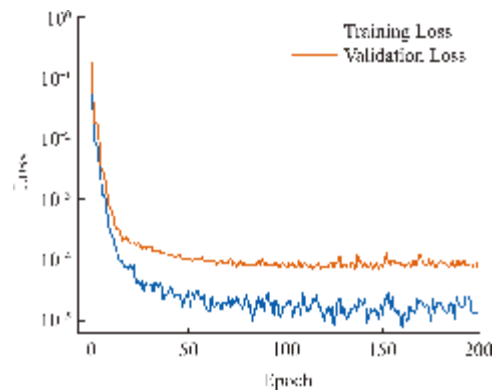


图 5 损失函数变化
Fig. 5 Variation of loss function

CNN 预测的应力-应变曲线与晶体塑性模拟结果的对比如图 6 所示。其中,红色实线代表 CPFEM

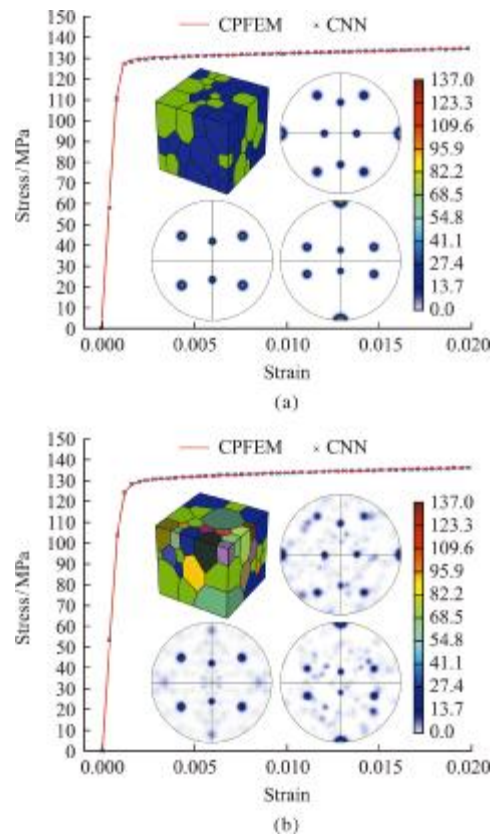


图 6 晶体塑性模型与 CNN 预测结果对比
Fig. 6 Comparison of crystal plasticity and CNN result

计算的应力值,蓝色标记×则表示 CNN 预测的应力值。可以看出,CNN 模型的预测结果与 CPFEM 的模拟结果吻合很好,证明了 CNN 在单轴拉伸应力-应变曲线预测中的应用潜力。

除了预测的高准确度之外,CNN 模型还显著提高了计算效率。CPFEM 计算 2% 的应变需要 5 h~6 h,而使用训练好的 CNN 处理输入并预测应力-应变曲线只需要 1 min~2 min,在取得同样精确结果的同时,大幅节省了算力,减少了预测所需计算时间。

5 结 论

本文提出了一种结合 CNN 模型与 CPFEM 的预测框架,成功预测了增材制造 CuCrZr 合金的单轴拉伸力学行为,不仅保证了预测的精度,还显著减少了计算时间,展示了其在增材制造铜合金力学性能预测的应用前景。主要研究内容和结论如下。

(1) 在晶体塑性模型中,考虑了增材制造铜合金的固溶强化、位错强化以及晶界强化对屈服强度的贡献。

(2) 在 CNN 模型中,则在输入中考虑了增材制造铜合金微结构的局部特征(如晶粒的几何形状和取向)及全局特征(如平均晶粒尺寸和极图)。

(3) 参数校正后的晶体塑性模型可准确再现实验中增材制造 CuCrZr 合金的单轴拉伸力学行为。

(4) 训练后的 CNN 模型在预测增材制造 CuCrZr 合金的单轴拉伸应力-应变曲线方面表现优异,CNN 预测结果与 CPFEM 结果吻合。

参考文献(References):

- [1] 卢秉恒. 增材制造技术-现状与未来[J]. 中国机械工程, 2020, **31**(1): 19-23. (LU Bing-heng. Additive manufacturing—Current situation and future [J]. *China Mechanical Engineering*, 2020, **31**(1): 19-23. (in Chinese))
- [2] Abdulhameed O, Al-Ahmari A, Ameen W, et al. Additive manufacturing: Challenges, trends, and applications [J]. *Advances in Mechanical Engineering*, 2019, **11**(2): 1-27.
- [3] Yi M, Tang W, Zhu Y Q, et al. A holistic review on fatigue properties of additively manufactured metals [J]. *Journal of Materials Processing Technology*, 2024, **329**: 118425.
- [4] Frazier W E. Metal additive manufacturing: A review [J]. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2014, **23**(6): 1917-1928.
- [5] 易敏, 常珂, 梁晨光, 等. 增材制造微结构演化及疲劳分散性计算[J]. 力学学报, 2021, **53**(12): 3263-3273. (YI Min, CHANG Ke, LIANG Chen-guang, et al. Computational study of evolution and fatigue dispersity of microstructures by additive manufacturing [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, **53**(12): 3263-3273. (in Chinese))
- [6] Li G X, Chandra S, Rahman R R A, et al. Machinability of additively manufactured titanium alloys: A comprehensive review [J]. *Journal of Manufacturing Processes*, 2022, **75**: 72-99.
- [7] Muhammad M, Nezhadfar P D, Thompson S, et al. A comparative investigation on the microstructure and mechanical properties of additively manufactured aluminum alloys [J]. *International Journal of Fatigue*, 2021, **146**: 106165.
- [8] 赵楠, 李多生, 叶寅, 等. 激光选区熔化成形 GH5188 合金微观组织及性能[J]. 航空学报, 2023, **44**(19): 294-305. (ZHAO Nan, LI Duo-sheng, YE Yin, et al. Microstructure and properties of GH5188 alloy fabricated by selective laser melting [J]. *Journal of Aeronautics*, 2023, **44**(19): 294-305. (in Chinese))
- [9] 张昭, 姚欣欣, 葛芄. Ti-Nb 合金激光粉末沉积增材制造显微组织的相场模拟[J]. 兵器材料科学与工程, 2018, **41**(5): 1-6. (ZHANG Zhao, YAO Xin-xin, Ge Peng. Phase-field simulation of microstructures of Ti-Nb alloys in laser powder depositions additive manufacturing [J]. *Ordnance Material Science and Engineering*, 2018, **41**(5): 1-6. (in Chinese))
- [10] Kuai Z Z, Li Z H, Liu B, et al. Microstructure and mechanical properties of CuCrZr/316L hybrid components manufactured using selective laser melting [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, **955**: 170103.
- [11] Tang X P, Chen X H, Sun F J, et al. A study on the mechanical and electrical properties of high-strength CuCrZr alloy fabricated using laser powder bed fusion [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, **924**: 166627.
- [12] Gradl P R, Protz C, Greene S E, et al. Development and hot-fire testing of additively manufactured copper combustion chambers for liquid rocket engine applications [A]. 53rd AIAA/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference [C]. 2017.
- [13] 廉艳平, 王潘丁, 高杰, 等. 金属增材制造若干关键

- 力学问题研究进展[J]. 力学进展, 2021, **51**(3): 648-701. (LIAN Yan-ping, WANG Pan-ding, GAO Jie, et al. Fundamental mechanics problems in metal additive manufacturing: A state-of-art review [J]. *Advances in Mechanics*, 2021, **51**(3): 648-701. (in Chinese))
- [14] Morshed-Behbahani K, Aliyu A, Bishop D P, et al. Additive manufacturing of copper-based alloys for high-temperature aerospace applications: A review [J]. *Materials Today Communications*, 2024, **38**: 108395.
- [15] Bai Y C, Zhao C L, Zhang Y, et al. Additively manufactured CuCrZr alloy: Microstructure, mechanical properties and machinability [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2021, **819**: 141528.
- [16] Hu W X, Yi M. Predicting tensile behavior and fatigue life of laser shock peened titanium alloy by crystal plasticity model[J]. *International Journal of Fatigue*, 2024, **187**: 108476.
- [17] 于飞, 廉艳平, 李明健, 等. 金属增材制造晶体塑性有限胞元自洽聚类分析方法[J]. 力学学报, 2024, **56**(7): 1916-1930. (YU Fei, LIAN Yan-ping, LI Ming-jian, et al. Crystal plasticity finite cell self-consistent clustering analysis method for metal additive manufacturing [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2024, **56**(7): 1916-1930. (in Chinese))
- [18] Tang W, Yi M, Chen L Q, et al. Classical fatigue theory informed phase-field model for high-cycle fatigue life and fatigue crack growth[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2024, **306**: 110212.
- [19] Sun S, Gong Q H, Ni Y, et al. A micromagnetic-mechanically coupled phase-field model for fracture and fatigue of magnetostrictive alloys[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2024, **191**: 105767.
- [20] Yi M, Xue M, Cong P H, et al. Machine learning for predicting fatigue properties of additively manufactured materials[J]. *Chinese Journal of Aeronautics*, 2024, **37**(4): 1-22.
- [21] 陈豪龙, 柳占立. 基于数据驱动模型求解热传导反问题[J]. 计算力学学报, 2021, **38**(3): 272-279. (CHEN Hao-long, LIU Zhan-li. Solving the inverse heat conduction problem based on data driven model[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2021, **38**(3): 272-279. (in Chinese))
- [22] 唐明健, 唐和生. 基于物理信息的深度学习求解矩形薄板力学正反问题[J]. 计算力学学报, 2022, **39**(1): 120-128. (TANG Ming-jian, TANG He-sheng. A physics-informed deep learning method for solving forward and inverse mechanics problems of thin rectangular plates[J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2022, **39**(1): 120-128. (in Chinese))
- [23] Ali U, Muhammad W, Brahme A, et al. Application of artificial neural networks in micromechanics for polycrystalline metals[J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, **120**: 205-219.
- [24] Gangi S S, Rao R N. Artificial neural network approach for prediction of stress-strain curve of near β titanium alloy[J]. *Rare Metals*, 2014, **33**(3): 249-257.
- [25] Yamanaka A, Kamijyo R, Koenuma K, et al. Deep neural network approach to estimate biaxial stress-strain curves of sheet metals[J]. *Materials & Design*, 2020, **195**: 108970.
- [26] Yang C, Kim Y, Ryu S, et al. Prediction of composite microstructure stress-strain curves using convolutional neural networks [J]. *Materials & Design*, 2020, **189**: 108509.
- [27] Feng H T, Prabhakar P. Parameterization-based neural network: Predicting non-linear stress-strain response of composites[J]. *Engineering with Computers*, 2024, **40**(3): 1621-1635.
- [28] Lee E H. Elastic-plastic deformation at finite strains [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1969, **36**(1): 1.
- [29] Hennessey C, Castelluccio G M, McDowell D L. Sensitivity of polycrystal plasticity to slip system kinematic hardening laws for Al₇₀₇₅-T6[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2017, **687**: 241-248.
- [30] Kalidindi S R, Bronkhorst C A, Anand L. Crystallographic texture evolution in bulk deformation processing of FCC metals[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1992, **40**(3): 537-569.
- [31] Salvan C, Briottet L, Baffie T, et al. CuCrZr alloy produced by laser powder bed fusion: Microstructure, nanoscale strengthening mechanisms, electrical and mechanical properties[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2021, **826**: 141915.
- [32] Hansen N. Hall-petch relation and boundary strengthening [J]. *Scripta Materialia*, 2004, **51**(8): 801-806.
- [33] Zhang S S, Zhu H H, Zhang L, et al. Microstructure and properties in QCr0.8 alloy produced by selective laser melting with different heat treatment[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, **800**: 286-293.
- [34] Frederick C O, Armstrong P J. A mathematical representation of the multiaxial Bauschinger effect [J]. *Materials at High Temperatures*, 2007, **24**(1): 1-26.

Predicting tensile behavior of additively manufactured copper alloys by convolutional neural network

XIAO Qing-hui¹, ZHANG Ren-jia², LIU Shi-jie³, HU Wen-xuan¹,
LÜ Chen-xi¹, ZHU Si-ying¹, YI Min^{*1}

(1. State Key Laboratory of Mechanics and Control for Aerospace Structures, NUAU, Nanjing 210016, China;

2. Beijing Institute of Aerospace Systems Engineering, Beijing 100076, China;

3. Beijing Aerospace Propulsion Institute & Laboratory of Science and Technology on Cryogenic Liquid Propulsion, Beijing 100076, China)

Abstract: Deep learning has gained significant attention due to its remarkable advantages in handling complex data and tasks, and has been successfully applied in material property prediction. Here, a mathematical framework combining the convolutional neural network (CNN) model with the crystal plasticity finite element method (CPFEM) that considers the strengthening contributions from solid solution, dislocation and grain boundary is proposed to predict the uniaxial tensile mechanical behavior of additively manufactured CuCrZr copper alloy by using its crystallographic texture polar figure, microstructure figure and grain size. The crystal plasticity model parameters are calibrated by using experimental results to verify the model's accuracy and predictive ability. Subsequently, a series of CPFEM simulations is conducted for different representative volume elements using the calibrated crystal plasticity model. These simulation results are used to train, validate, and test the CNN model. The results show that the CNN model significantly reduces the computation time while guaranteeing the prediction accuracy, demonstrating its promising application in mechanical property prediction.

Key words: additive manufacturing; convolutional neural networks; crystal plasticity; copper alloys

(上接第 821 页)

Study on formation mechanism of molten pool defects during selective laser melting process

ZHOU Xiang, JIANG Wu-gui^{*}, LI Qi, CHEN Tao, PENG Jie

(School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: A three-dimensional high fidelity computational fluid dynamics model was used to study the melt flow and defect formation process of nickel-based high-temperature alloy GH4169 during SLM, revealing the formation mechanisms of molten pool defects such as denudation and balling during the SLM process. The simulation results indicated that the primary driving forces governing the molten pool are the Marangoni force and surface tension, where the Marangoni force causes the melt pool to flow out from the inside, while surface tension causes the melt pool to flow inwards from the outside. Denudation phenomena usually occur near the molten pool. When the denudation area is small, it appears and disappears periodically. However, when the denudation area is large, a limited amount of molten liquid cannot sufficiently fill the large denudation area, resulting in surface quality degradation. Furthermore, when the length-to-depth ratio of the melt pool is lower than 3.4, balling is more likely to occur at the interface between the high-temperature region dominated by Marangoni force and the low-temperature region dominated by surface tension. The present work contributes to guiding process optimization and improving the surface quality of SLM parts.

Key words: selective laser melting; computational fluid dynamics; nickel-based superalloy; molten pool defect; surface quality