

表面机械研磨处理纯铜的宏-细观耦合数值研究

王 成¹, 胡兴远¹, 李开发¹, 李 坤¹, 王 龙¹, 王传礼²

(1. 安徽理工大学 机械工程学院, 安徽 淮南 232001)

(2. 安徽理工大学 矿山智能装备与技术安徽省重点实验室, 安徽 淮南 232001)

摘 要: 发展一种耦合宏-细观的数值模拟方法, 多尺度研究表面机械研磨处理 (SMAT) 纯铜的动态晶粒细化行为及残余应力状态。首先建立 SMAT 宏观有限元模型, 计算 SMAT 细化的晶粒尺寸; 然后根据平均晶粒尺寸建立细观多晶体模型, 并将 SMAT 宏观有限元模型计算的滑移阻力导入到晶体塑性本构模型, 同时将宏观模型输出的应变场转换成多晶体模型的位移边界条件; 最后进行当前材料硬化状态下的晶体塑性有限元计算, 进而分析宏观模型中一个材料点处细观组织结构的应力状态和晶粒取向分布。结果表明, 在 SMAT 过程中, 随着多弹丸不定向冲击次数的增加, 纯铜表层细化的晶粒尺寸逐渐减小, 表面宏、细观残余压应力逐渐增大, 但晶粒取向分布的不均匀度呈现出先增大后减小的趋势。

关键词: 表面机械研磨处理; 晶粒细化; 残余应力; 位错密度演化; 宏-细观耦合数值模拟

中图分类号: TG174.4

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)11-3957-09

在服役环境下, 机械零部件的失效大多源于其表面, 金属材料的疲劳、腐蚀和磨损对其表面组织结构和性能十分敏感。为了延长零部件的使用寿命和发挥材料的潜力, 各种表面强化技术应运而生, 成为科学研究中的重点领域之一。

表面机械研磨处理 (surface mechanical attrition treatment, SMAT) 源自于传统的喷丸强化技术, 是 21 世纪以来发展的一种新型表面处理技术^[1,2]。如图 1 所示, 利用球形弹丸 ($\Phi=1\sim 10\text{ mm}$) 对金属表面进行高频高速 ($f=50\sim 20000\text{ Hz}$, $v=1\sim 20\text{ m/s}$)、不定向地重复冲击, 促使金属表层粗晶组织在不同方向产生剧烈塑性变形而不断发生细化, 利用细-粗晶组织结构的梯度分布可以同时提高材料的强度和韧性^[3]。另外, SMAT 能够在材料的表面及亚表层注入有益的残余压应力, 有效抑制表面疲劳裂纹的萌生和扩展^[4]。因此, SMAT 能够有效改善材料的整体力学性能和环境使役行为, 在工业生产中具有巨大的开发潜力。

纯铜具有中高层错能, 在 SMAT 诱导晶粒细化至超细晶的过程中, 塑性变形方式主要是位错滑移。位错经过滑移运动、交互作用和重新排列等形式产生位错墙, 位错墙将晶粒分成较小尺寸的位错胞, 胞壁位错发生湮灭和重排, 转化为亚晶界, 以此类推, 随着位错胞尺寸的减小, 晶粒不断细化^[5], 如图 1 所示。Estrin^[6]等人基于剧烈塑性变形导致晶粒细化的物理机制, 提出了一种位错密度演化模型。将宏观有限元

模型计算的等效塑性应变和等效塑性应变率导入该位错密度演化模型, 可直接评估材料细化的晶粒尺寸和增加的位错密度。Hassani-Gangaraj 等人^[7]通过耦合 Johnson-Cook 模型和位错密度演化模型, 建立了一种评估晶粒细化行为的计算框架, 预测了喷丸强化 AISI 4340 钢的表层晶粒尺寸, 并通过实验对预测结果进行了验证。Hu 等人^[8]采用类似的方法计算了喷丸强化 GH 4169 高温合金诱导细化的表层晶粒尺寸。Wang 等人^[9-11]发展了一种基于位错密度演化的本构模型, 通过有限单元法将材料的宏观塑性变形与微观位错密度演化构成一个闭环的计算框架, 模拟严重喷丸强化和激光喷丸强化诱导的晶粒细化行为。

尽管利用位错密度演化模型结合有限元数值计算方法能够从宏观上评估材料的晶粒细化行为, 但不能深入探究晶粒在细化过程中的变形行为以及微观组织结构的应力状态。这可以采用晶体塑性理论进行实现, 晶体塑性本构模型通过引入滑移体系、流动法则和硬化准则, 研究细观多晶体在外载荷作用下的力学行为^[12-14]。针对弹丸冲击载荷工况, Kanou 等人^[15]将几何必需位错密度引入到晶体塑性本构模型中, 研究了材料的微观组织在单个弹丸撞击下的硬化行为; Rousseau 等人^[16]结合晶体塑性本构的唯像模型与位错动力学, 研究金属材料的微观组织在弹丸流撞击过程中的变形行为, 发现弹丸流倾斜撞击比垂直撞击更有效细化金属表面的晶粒组织。

收稿日期: 2020-11-11

基金项目: 国家自然科学基金 (51705002); 安徽省自然科学基金 (2008085QE228); 安徽省高校自然科学研究重点项目 (KJ2019A0126)

作者简介: 王 成, 男, 1988 年生, 博士, 安徽理工大学机械工程学院, 安徽 淮南 232001, E-mail: chwang@aust.edu.cn

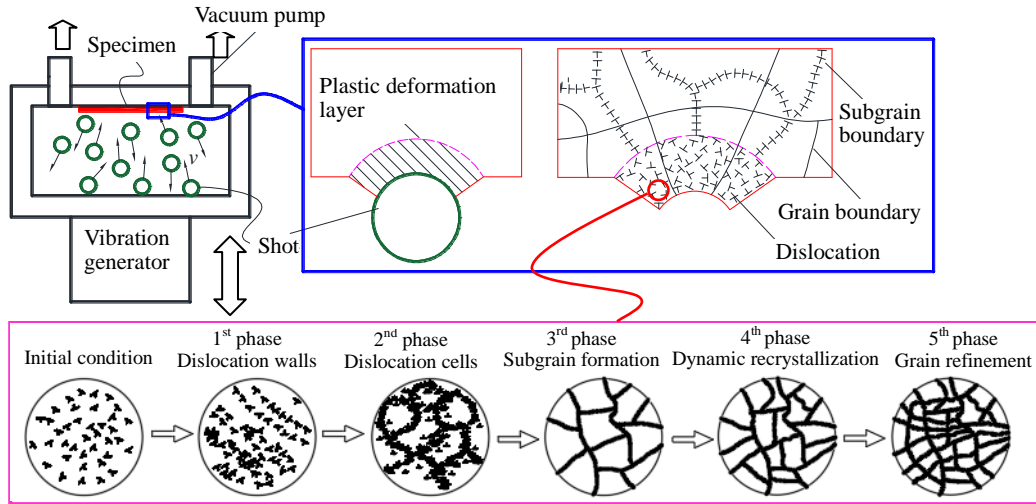


图 1 SMAT 诱导晶粒细化的变形机理示意图

Fig.1 Schematic of grain refinement induced by SMAT^[5]

相比于宏观有限元模型,细观晶体塑性模型的计算成本非常大,一般不直接采用晶体塑性模型进行实验尺度下的数值模拟计算,而通常利用代表性体积单元(RVE)来建立细观晶体塑性模型与宏观有限元模型之间的联系^[17,18]。然而,绝大多数的RVE模型不能考虑到材料的动态晶粒细化行为,因此很少用来模拟SMAT诱导的晶粒细化过程。为此,本研究基于位错密度演化模型建立SMAT宏观有限元模型与细观多晶体塑性模型之间的联系,耦合宏-细观多尺度研究SMAT诱导的动态晶粒细化行为和残余应力状态,有助于提高SMAT的研究水平,为SMAT的多尺度建模提供思路。

1 宏观 SMAT 有限元建模及验证

基于 ABAQUS 有限元分析平台,建立三维 SMAT 宏观有限元模型,如图 2 所示。靶体模型的几何尺寸为:长 8 mm,宽 8 mm 和高 3 mm。大量弹丸不定向重复冲击于靶体上表面 2 mm×2 mm 的中心区域,固定靶体下表面以消除刚体位移。采用三维八节点线性减缩积分实体单元(C3D8R)对靶体模型进行划分网格,并且对承受冲击载荷的局部区域进行网格细化,最小单元尺寸为 20 μm^[9,10]。由于弹丸的硬度远大于靶体材料的硬度,弹丸在冲击过程中产生的塑性变形可忽略不计,因此将弹丸处理成解析刚性体,并将弹丸的质量和初始速度均集中施加在其参考点上,参考点位于弹丸的球心。弹丸的冲击角度随机分布于 70°到 90°之间,初始速度为 3 m/s。弹丸与靶面之间的接触利用罚函数法进行计算,摩擦系数取 0.3^[9,10]。为了提高计算效率,采用多模型分步并行计算的方法^[19]模拟多弹丸冲击的 SMAT 过程。

为了定量研究 SMAT 诱导的动态晶粒细化行为和残余应力状态,采用耦合宏观塑性变形与微观位错密度演化的材料本构模型^[9-11]表征纯铜在 SMAT 过程中的动力学行为。在该本构模型中,金属材料被视为由位错胞壁和位错胞内组成的“双相复合组织结构”,材料的变形抗力取决于位错胞壁和位错胞内的位错密度演化以及位错胞壁的体积分数变化^[20,21],具体的流动应力可表示为:

$$\sigma_f = \sigma_1 + M\eta Gb [f\sqrt{\rho_w} + (1-f)\sqrt{\rho_c}] \cdot \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0}\right)^{1/m^*} \quad (1)$$

式中,σ₁表示与塑性应变无关的初始屈服应力;M是泰勒系数;η是一个材料常数;G是剪切模量;b是Burgers矢量的大小;γ^r表示分切应变率,γ^r=Mε^p,其中ε^p表示等效塑性应变率;γ₀表示参考分切应变率;m*表示应变率硬化敏感性指数;f表示位错胞壁的体积分数,可计算为f=f_∞+(f₀-f_∞)exp(-γ^r/γ^r),其中f₀和f_∞

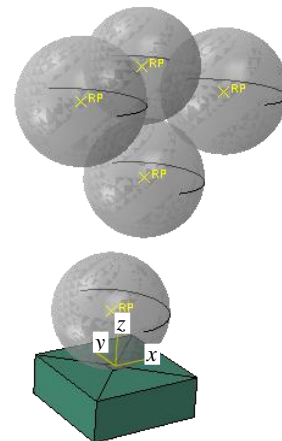


图 2 SMAT 宏观有限元模型

Fig.2 Macro-scale finite element model of SMAT

分别表示 f 的初值和饱和值, $f_0 > f_\infty$, $\tilde{\gamma}^r$ 用于表征 f 的衰减速率; ρ_w 和 ρ_c 分别表示位错胞壁和位错胞内的位错密度, 可采用一组耦合方程进行表征其演化^[20,21]

$$\dot{\rho}_c = \frac{\alpha^* \dot{\gamma}^r \sqrt{\rho_w}}{\sqrt{3}b} - \frac{6\beta^* \dot{\gamma}^r}{bd(1-f)^{1/3}} - k_0 \dot{\gamma}^r \rho_c \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0} \right)^{-1/n} \quad (2)$$

$$\dot{\rho}_w = \frac{\sqrt{3}\beta^* \dot{\gamma}^r (1-f) \sqrt{\rho_w}}{fb} + \frac{6\beta^* \dot{\gamma}^r (1-f)^{2/3}}{bdf} - k_0 \dot{\gamma}^r \rho_w \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0} \right)^{-1/n} \quad (3)$$

公式(2)和公式(3)右边的第 1 项表示位错胞界面上由于 Frank-Read 源激活引起位错胞内和位错胞壁的位错生长率, 第 2 项表示位错胞内的一部分位错转移到位错胞壁并成为位错胞壁的组成部分, 第 3 项表示位错胞内和位错胞壁位错的湮没。式中, α^* 、 β^* 和 k_0 分别是与位错的生长、移动和湮没相关的材料参数; n 是率相关的敏感指数; d 表示平均位错胞尺寸, 其大小与总体位错密度(ρ_t)的平方根成反比^[20,21]

$$d = K / \sqrt{\rho_t} \quad (4)$$

$$\rho_t = f \rho_w + (1-f) \rho_c \quad (5)$$

式中, K 是一个材料常数。

在有限元计算过程中, 基于显式时间积分算法和径向应力更新算法, 并结合 Mises 屈服准则和相关联流动法则, 耦合宏观塑性变形与微观位错密度演化的材料本构模型 (公式(1)~(5)) 被开发成一个用户材料子程序 (VUMAT) 并嵌入通用有限元程序 ABAQUS/Explicit 中, 该 VUMAT 的详细计算流程可参见文献[9]。表 1 列出了纯铜的相关材料参数, 取自于文献[20,21]。

利用 SMAT 宏观有限元模型模拟文献[22]中单次定向冲击实验过程。为了简化模型, 将文献[22]中圆柱形撞针建模成一个球形刚性体 (弹丸), 弹丸的直径与撞针半球形尖端的直径一致 ($D=1$ mm), 弹丸的质量等于撞针的整体质量 ($m_{\text{shot}}=1.96$ g)。共模拟 3 种工况: 初始速度保持 10 m/s 不变, 冲击角度分别为 70°、80°和 90°。图 3 比较了数值模拟的凹坑形貌与实验测量结果, 显然可见, 在相同的工况条件下,

两者具有很好的一致性, 进而验证了 SMAT 宏观有限元模型的有效性。然而, 仔细观察会发现: 在凹坑的边界处, 数值模拟的凹坑形貌与实验测量结果存在一定的差异。这主要归因于实验撞针与弹丸几何模型之间的差异: 实验撞针的质量中心位于撞针 (圆柱体) 的几何中心, 而弹丸模型的质量集中于其球心, 质心位置较高的撞针在撞击过程中会发生偏转, 撞针尾部打击到凹坑周边区域, 但球形弹丸不会发生这种情况, 进而导致凹坑边界处塑性变形量的不同。

2 细观晶体塑性模型

SMAT 诱导晶粒细化主要归结于材料的剧烈塑性变形, 而位错滑移是一种重要的塑性变形方式, 因此可采用基于位错滑移塑性变形机制的晶体塑性理论探究 SMAT 诱导晶粒细化的变形行为。

对于率相关晶体塑性本构模型, 流动法则通常采用幂函数来描述:

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right|^{1/m} \text{sgn}(\tau^\alpha) \quad (6)$$

式中, $\dot{\gamma}^\alpha$ 表示滑移系 α 的分切应变率, $\dot{\gamma}_0$ 表示参考分切应变率, $\dot{\gamma}_0 = 1$, m 为应变率敏感性指数, $m=0.012$, τ^α 和 g^α 分别表示滑移系 α 的分切应力和滑移阻力。

分切应力与 Cauchy 应力之间的关系为:

$$\tau^\alpha = \boldsymbol{\sigma} : (\mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha) \quad (7)$$

式中, \mathbf{m}^α 和 \mathbf{n}^α 分别表示滑移系 α 的滑移方向和法向, Cauchy 应力 $\boldsymbol{\sigma}$ 可通过第二类 Piola-Kirchhoff 应力 \mathbf{T} 计算得到:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{F}^e \mathbf{T} \mathbf{F}^{eT} / \det(\mathbf{F}) \quad (8)$$

$$\mathbf{T} = \mathcal{H} : \mathbf{E}^e, \mathbf{E}^e = (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I}) / 2 \quad (9)$$

式中, \mathbf{F}^e 是变形梯度 \mathbf{F} 的弹性部分, 可以通过乘法分解得到 $\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p$, 其中 \mathbf{F}^p 是变形梯度 \mathbf{F} 的塑性部分, \mathbf{F}^p 与 $\dot{\gamma}^\alpha$ 之间的关系为 $\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p \mathbf{F}^{p-1} = \sum \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha$, \mathbf{L}^p 为速度梯度张量的塑性部分; \mathcal{H} 是由弹性模量 C_{11} 、 C_{12} 和 C_{44} 组成的四阶弹性张量, 其中 $C_{11}=186$ GPa, $C_{12}=93$ GPa 和 $C_{44}=46.5$ GPa^[23]; \mathbf{E}^e 为 Green 应变张量; \mathbf{I} 为单位张量。

表 1 纯铜本构模型的材料参数

Table 1 Parameters of copper constitutive model^[20,21]

α^*	β^*	k_0	M	$\dot{\gamma}_0 / \text{s}^{-1}$	$\rho_{w0} / \text{mm}^{-2}$	f_0	f_∞	K	m^*	n	$\tilde{\gamma}^r$	G / GPa	$\rho_{c0} / \text{mm}^{-2}$	b / mm	η
0.065	0.012	9.2	3.06	1	5×10^7	0.25	0.06	10	250	50	3.2	48	2.5×10^7	2.56×10^{-7}	0.25

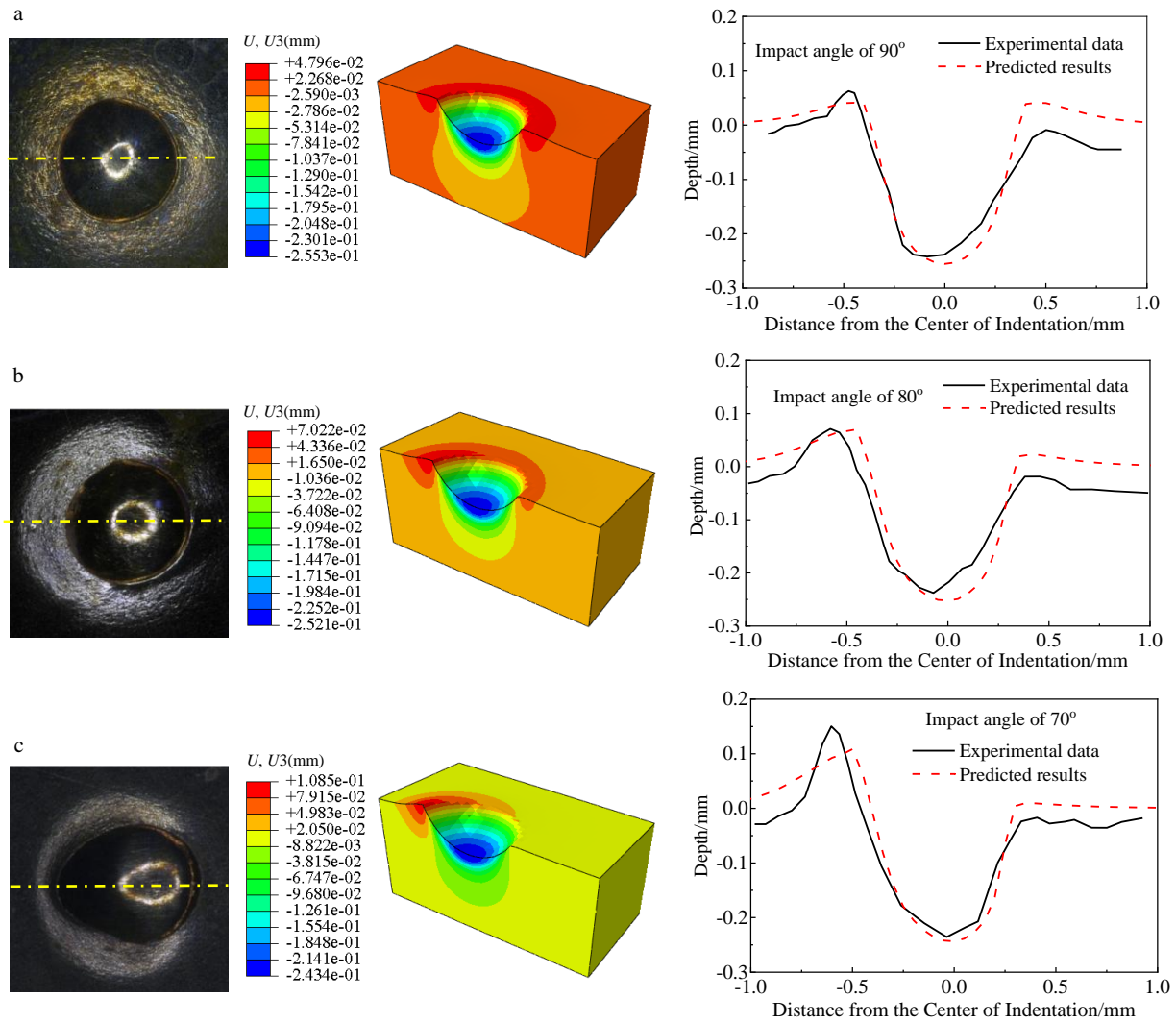


图 3 单次冲击形成凹坑形貌的数值预测结果与实验结果比较

Fig.3 Comparison between the predicted indentation profiles and experiment data^[22] in the case of single shot impact: (a) initial velocity of 10 m/s and impact angle of 90 °; (b) initial velocity of 10 m/s and impact angle of 80 °; and (c) initial velocity of 10 m/s and impact angle of 70 °

假设纯铜材料呈现各向同性硬化，采用一个基于位错密度演化的等效滑移阻力 g^α 来表征其晶粒尺度下的硬化行为：

$$g^\alpha = \eta G b \left[f \sqrt{\rho_w} + (1-f) \sqrt{\rho_c} \right] \cdot \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0} \right)^{1/m^*} \quad (10)$$

比较公式(10)和公式(1)可以发现， g^α 的数值可以通过耦合宏观塑性变形与微观位错密度演化的材料本构模型计算得到。因此率相关晶体塑性本构模型中的硬化模型与宏观有限元模型中的本构模型本质上达到了一致，即两者都是基于微观位错密度的演化。

为了验证上述晶体塑性本构模型的有效性，建立一个长、宽、高均为 2 μm 的立方体模型，采用单个网格

将其离散成一个单元，如图 4 所示。在该模型的上表面上施加位移载荷，固定其下表面，利用耦合宏观塑性变形与微观位错密度演化的材料本构模型（公式(1)~(5)）计算不同位移载荷下的应力-应变响应、平均位错胞尺寸和滑移阻力，如图 5a 所示。假设纯铜细化的位错胞尺寸与由位错胞演变形成的亚晶粒尺寸相当，则可采用平均位错胞尺寸近似细化的平均晶粒尺寸，建立多晶体模型。为了简便起见，根据细化的平均晶粒尺寸对该立方体模型重新划分网格，每 1 个单元代表 1 个晶粒，晶粒的初始取向通过随机分布函数确定，如图 4 所示，并且将宏观有限元模型计算的滑移阻力导入该多晶体的晶体塑性本构模型（公式(6)~(10)）中，另外通过位移场将宏观有

有限元模型计算的应变施加到该多晶体模型上，计算该多晶体的应力-应变响应如图 5b 所示。由图可见，宏观有限元模型与细观多晶体模型的计算结果总体上具有很好的一致性，进而验证了基于位错密度演化的晶体塑性模型的有效性。然而，从图 5b 中可以看到，当应变大于 0.3 时，宏、细观模型的计算结果存在差异。这主要是因为随着塑性变形的不断增大，晶粒细化导致晶粒的个数不断增加，晶粒的形状、尺寸以及相邻晶粒边界之间的相互作用对多晶体力学行为的影响越来越大，而图 4 简化的多晶体模型不能有效地考虑到这些不断增大的影响。然而，宏观有限元模型计算的应力-应变关系是基于唯象理论，通过在公式(1)中引入泰勒系数 (M) 建立分解切应力与流动应力之间的关系、分切应变率与等效塑性应变率之间的关系，进而考虑了多晶体在细化过程中不断增加的晶粒结构的影响。因此，宏、细观模型计算结果之间的差异主要可归结于细观多晶体模型的简化。

3 耦合宏-细观的模拟策略

综上所述，利用位错密度演化模型可将宏观有限元模型与细观晶体塑性模型联系起来，耦合宏-细观多尺度研究材料在塑性变形过程中的力学行为。对于 SMAT 诱导的动态晶粒细化行为及残余应力状态，采取耦合宏-细观的模拟策略如下：

- (1) 建立 SMAT 宏观有限元模型，模拟 SMAT 多弹丸不定向冲击过程。
- (2) 将受冲击表面上尺寸为 $1\text{ mm} \times 1\text{ mm}$ 的中心局部区域看做“参考域”，采用面积平均法^[24]求其滑移阻力、应变和晶粒尺寸的均值。
- (3) 将该参考域理想化为一个材料点，参考域内计算结果的均值作为该材料点的状态变量。
- (4) 建立长、宽、高均等于 10 倍平均晶粒尺寸的细观多晶体模型，以表征该材料点的内部微观组织结构，采用 C3D8R (ABAQUS/Explicit) 单元划分网格，网格尺寸等于材料点的平均晶粒尺寸，因此该多晶体有限元模型中一个单元代表一个晶粒，共有 1000 个晶粒。

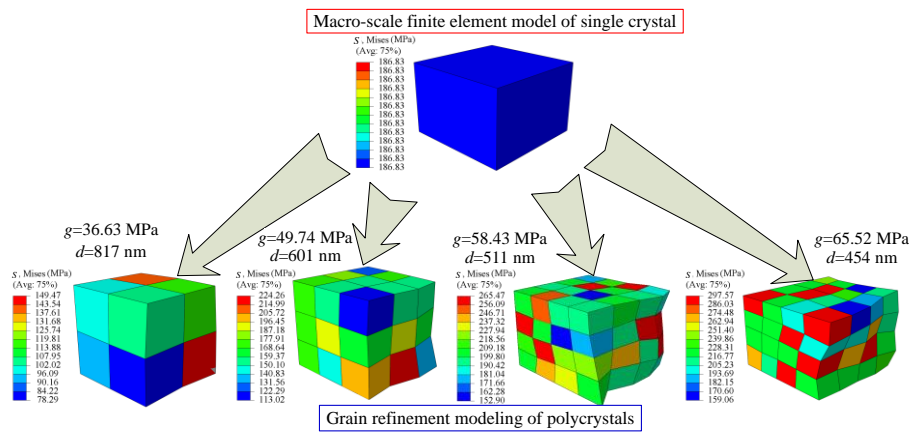


图 4 宏观有限元模型与细观多晶体模型之间的耦合计算

Fig.4 Macro-scale finite element model and micro-scale polycrystal plasticity model coupled simulation

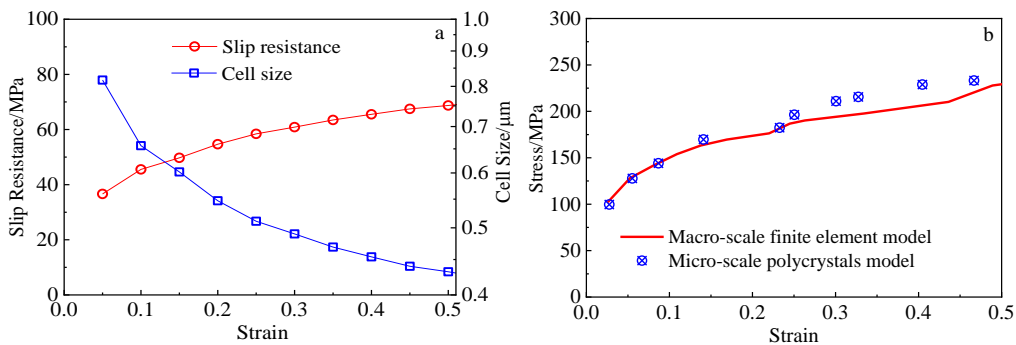


图 5 宏观有限元模型和细观多晶体模型的计算结果及其比较

Fig.5 Simulation results of macro-scale finite element model and micro-scale polycrystals: (a) slip resistance and dislocation cell size and (b) comparison of the stress-strain responses resulted from the macro-scale finite element model and micro-scale polycrystals

(5) 将材料点的滑移阻力导入到晶体塑性本构模型，再将材料点的应变场转换成位移场，施加到细观多晶体模型相邻的 3 个面上，剩下 3 个面施加对称约束，进行材料点当前硬化状态下的晶体塑性有限元计算。详细模拟流程如图 6 所示。

4 SMAT 数值模拟结果

4.1 宏观 SMAT 有限元模拟结果

在 SMAT 过程中，靶体细化的位错胞尺寸及其残余应力分布如图 7 所示，图中符号“S11”表示面内 x 方向的残余应力，即 σ_x 。从图中可以看到，在大量弹丸不定向的冲击载荷作用下，靶体受冲击表面上形成很多的堆积

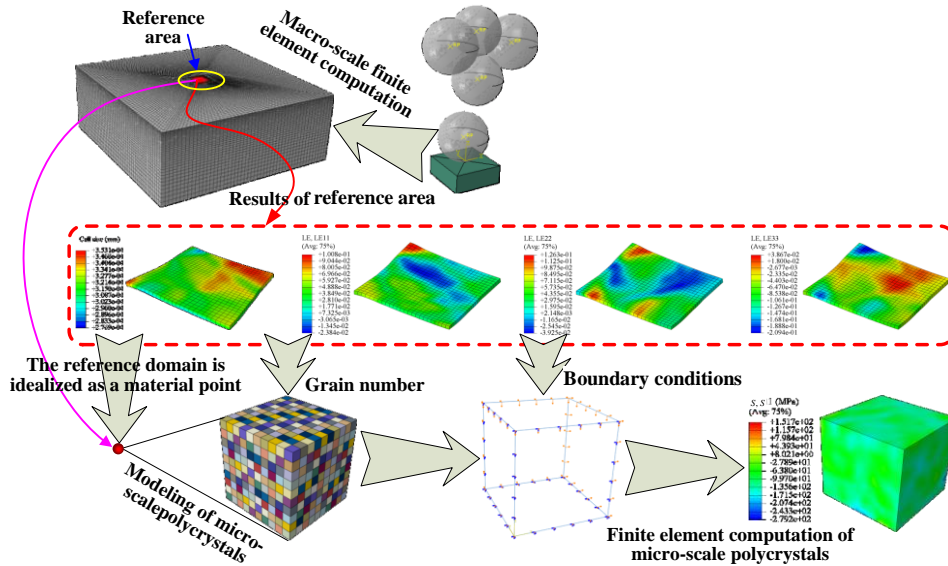


图 6 耦合宏-细观的模拟策略

Fig.6 Macro-micro coupled simulation method

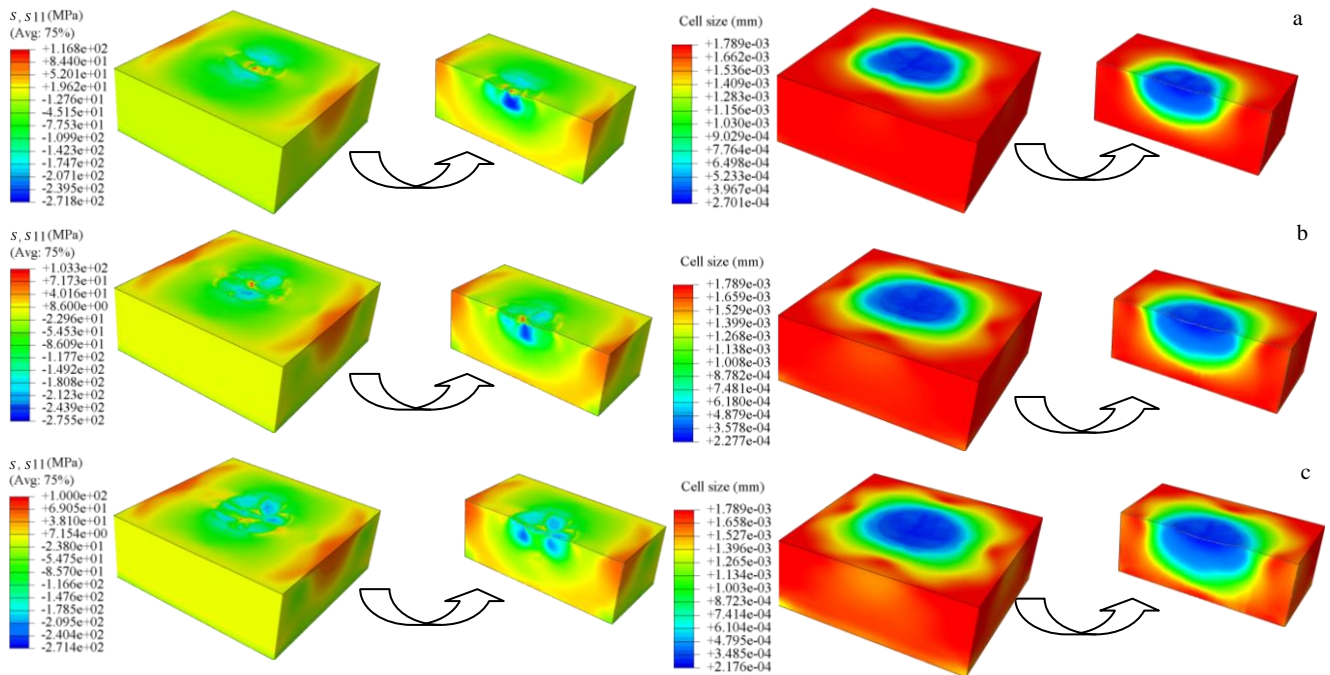


图 7 SMAT 宏观有限元计算的多弹丸不定向冲击工况下位错胞尺寸和残余应力

Fig.7 Cell sizes and residual stresses resulted from macro-scale finite element simulation of shot multi-direction impacts during SMAT: (a) 30 shot impacts, (b) 60 shot impacts, and (c) 90 shot impacts

区域，由于不均匀的弹塑性变形，在这些堆积区域中产生了不利的表面残余拉应力；然而，相对较大程度的晶粒细化也发生在这些堆积的局部区域，这主要归结于材料的剧烈塑性变形。由靶体模型的剖面图可以看到，SMAT 诱导的最大残余压应力主要位于靶体的亚表层，并随着弹丸冲击次数的增加而增大；另外，靶体细化的位错胞尺寸在其厚度方向上呈现明显的梯度变化。

图 8 给出了靶体受冲击表面参考域内位错胞尺寸和残余压应力的均值。显然可见，随着多弹丸不定向冲击次数的增加，受冲击表面细化的位错胞尺寸逐渐减小，即晶粒不断细化，而表面残余压应力逐渐增大，模拟结果与文献[19]的结论相一致。

4.2 细观多晶体有限元模拟结果

根据靶体受冲击表面参考域内位错胞尺寸的平均值，建立相应硬化状态下的细观多晶体模型，如图 6 所示，同时将参考域内的平均滑移阻力和应变场施加到该细观多晶体模型中，计算多晶体的力学响应如图 9 所示。显然可见，由于相邻晶粒之间的取向差异，多晶体模型呈现出明显不均匀的应力分布。比较图 9 可以发现，随着弹丸冲击次数的增加，多晶体响应的最大（或最小）等效 Mises 应力逐渐增大，以及沿 x 方向的最大细观残余压应力也逐渐增大。从图中可以看到，最大等效 Mises

应力大多位于材料表层晶粒的交界处，这说明 SMAT 纯铜的表面缺陷（微裂纹）大概率萌生于晶界处。特别地，相比于 30 次和 60 次弹丸冲击工况，90 次弹丸冲击可使多晶体模型整体呈现残余压应力状态，并且最大细观残余压应力可达到 837.2 MPa，这说明增加弹丸冲击次数（延长 SMAT 时间）会有助于诱导受冲击表面细观残余压应力的产生。

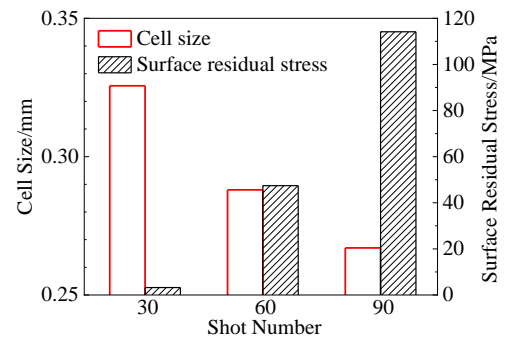


图 8 参考域内位错胞尺寸和表面残余压应力随弹丸个数的变化

Fig.8 Relationship between the cell size, surface compressive residual stress within the reference area and the number of shot impacts

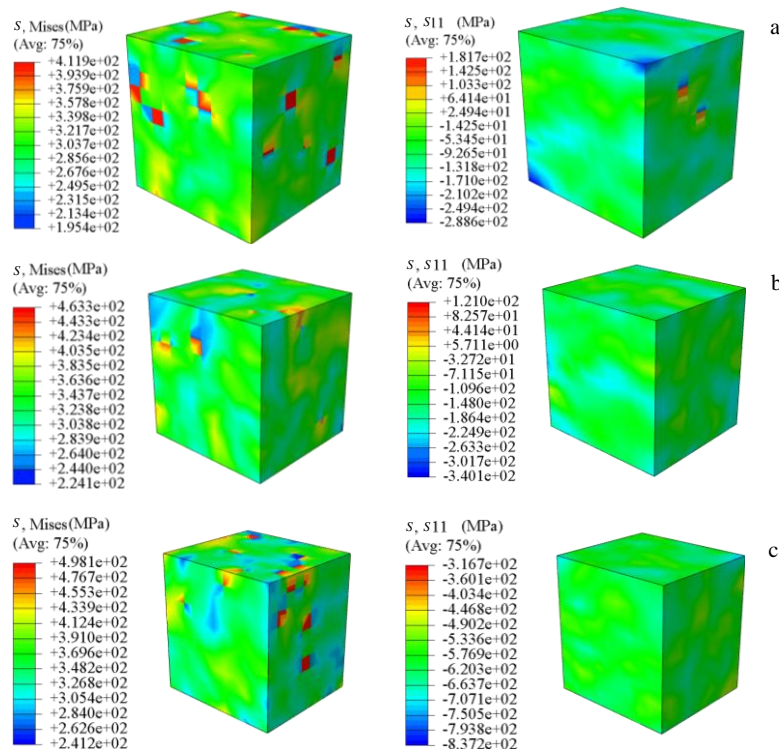


图 9 多弹丸不定向冲击工况下细观多晶体模型计算的应力分布

Fig.9 Stress distributions of micro-scale polycrystals of shot multi-direction impacts: (a) 30 shot impacts, (b) 60 shot impacts, and (c) 90 shot impacts

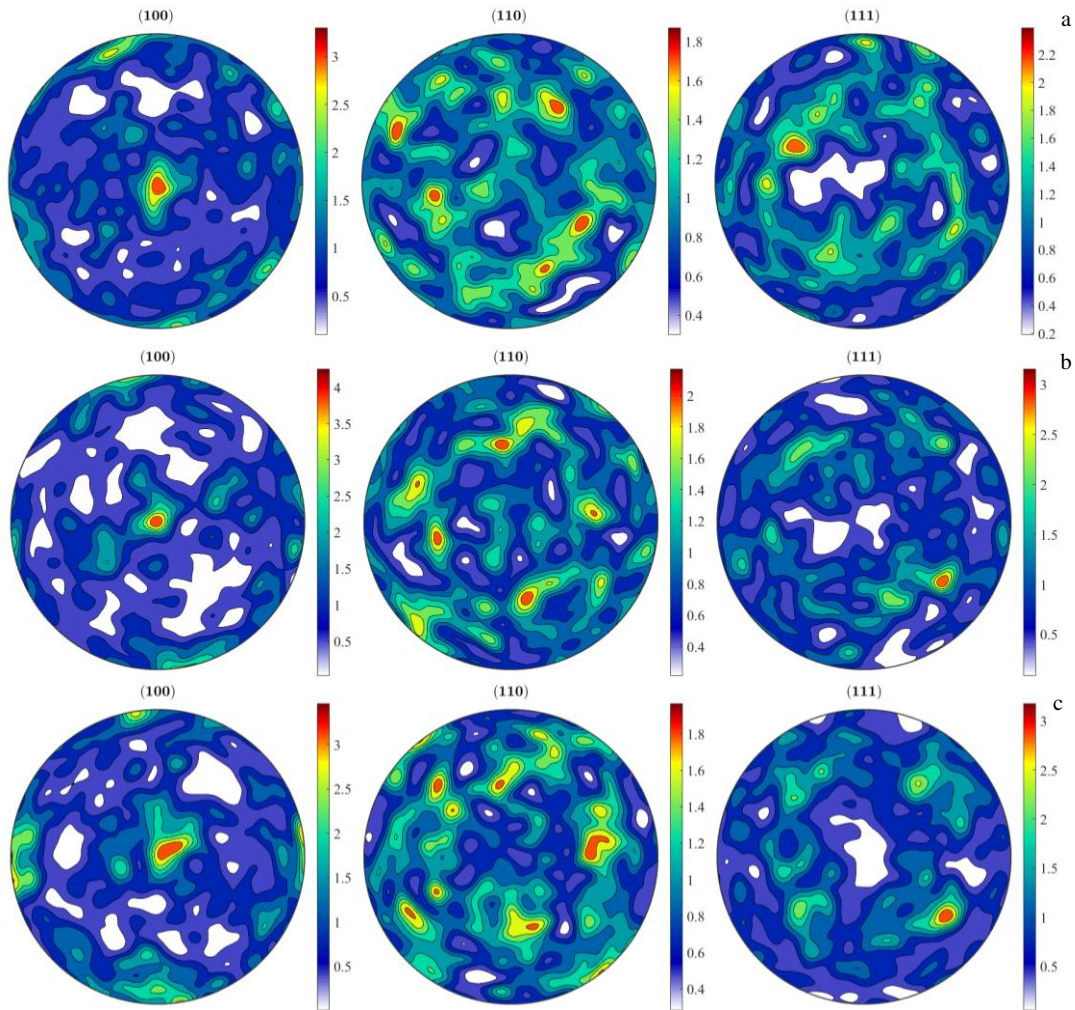


图 10 细观多晶体模型计算的多弹丸不定向冲击工况下晶粒取向分布

Fig.10 Grain orientation distributions of micro-scale polycrystals of shot multi-direction impacts: (a) 30 shot impacts, (b) 60 shot impacts, and (c) 90 shot impacts

图 10 给出了不同弹丸冲击次数下多晶体响应的晶粒取向分布。由图可见，不同弹丸冲击次数下，多晶体响应的晶粒取向分布在视觉上十分类似，但仔细观察其织构强度会发现，随着多弹丸不定向冲击次数的增加，多晶体取向的织构强度也呈现出先增大后减小的趋势。这说明在 SMAT 诱导晶粒细化过程中，前期少数的弹丸不定向冲击会导致材料表层晶粒取向择优分布，然而随着弹丸不定向冲击次数的增加，晶粒取向反而逐渐趋向于随机分布，弱化前期的择优取向，提高表层晶粒取向分布的均匀性，模拟结果与文献[25]中实验观察到的现象相一致。

5 结 论

1) SMAT 宏观有限元模型预测弹丸单次定向冲击形成的凹坑形貌与实验结果十分吻合，进而验证了 SMAT

宏观有限元模型的有效性。

2) 细观多晶体模型预测的应力-应变响应与宏观有限元计算结果相一致，进而验证了基于位错密度演化的晶体塑性模型以及耦合宏-细观数值模拟方法的有效性。

3) 随着多弹丸不定向冲击次数的增加，材料表层晶粒尺寸减小，表面宏、细观残余压应力增大，晶粒取向分布的不均匀度呈现先增大后减小的趋势。

参考文献 References

- [1] Wen Lei(文 磊), Yuan Yong(袁 勇), Wang Yaming(王亚明) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2015, 44(6): 1320
- [2] Lu K, Lu J. *Materials Science and Engineering A*[J], 2004, 375: 38
- [3] Yin Z, Yang X, Ma X *et al. Materials & Design*[J], 2016, 105: 89

- [4] Ortiz A L, Tian J W, Shaw L L *et al. Scripta Materialia*[J], 2010, 62(3): 129
- [5] Li K, He Y, Fang C *et al. Journal of Nanoscience and Nanotechnology*[J], 2014, 14(12): 9637
- [6] Estrin Y, Toth L S, Molinari A *et al. Acta Materialia*[J], 1998, 46(15): 5509
- [7] Hassani-gangaraj S M, Cho K S, Voigt H J L *et al. Acta Materialia*[J], 2015, 97: 105
- [8] Hu D, Gao Y, Meng F *et al. Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2018, 49(4): 1397
- [9] Wang C, Wang L, Wang X *et al. International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2018, 146: 280
- [10] Wang C, Lai Y, Wang L *et al. Surface and Coatings Technology* [J], 2020, 383: 125 247
- [11] Wang C, Wang L, Wang C L *et al. Optics & Laser Technology*[J], 2020, 121: 105 827
- [12] Qin Fangcheng(秦芳诚), Li Yongtang(李永堂), Ju Li(巨 丽) *et al. Journal of Mechanical Engineering(机械工程学报)*[J], 2016, 52(16): 42
- [13] Zhang Keshi(张克实), Huang Shihong(黄世鸿), Liu Guilong(刘贵龙) *et al. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics(力学学报)*[J], 2017, 49(4): 870
- [14] Wang C, Wu H, Wang X *et al. International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2020, 177: 105 553
- [15] Kanou S, Nishikawa M, Soyama H. *International Journal of Mechanical Sciences*[J], 2013, 75: 316
- [16] Rousseau T, Nougier-lehon C, Gilles P *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2018, 101: 42
- [17] Fan Wanwan(范婉婉), Wang Tao(王 涛), Hou Jie(侯 洁) *et al. Journal of Plasticity Engineering(塑性工程学报)*[J], 2019, 26(4): 268
- [18] Lu X, Zhang X, Shi M *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2019, 113: 52
- [19] Wang C, Wang C, Wang L *et al. International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2020, 108(1-2): 505
- [20] Lee D J, Yoon E Y, Ahn D H *et al. Acta Materialia*[J], 2014, 76: 281
- [21] Lemiale V, Estrin Y, Kim H S *et al. Computational Materials Science*[J], 2010, 48(1): 124
- [22] Gu Zhenbiao(顾桢标). *Thesis for Master(硕士论文)*[D]. Hangzhou: Zhejiang University of Technology, 2015
- [23] Zhang H, Dong X, Wang Q *et al. Computational Materials Science*[J], 2012, 54: 208
- [24] Wang C, Hu J, Gu Z *et al. Chinese Journal of Mechanical Engineering*[J], 2017, 30(2): 344
- [25] Wang Chengxi(王成蹊). *Thesis for Doctorate(博士论文)*[D]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University, 2017

Macro-micro Coupled Simulation of Surface Mechanical Attrition Treatment of Copper

Wang Cheng¹, Hu Xingyuan¹, Li Kaifa¹, Li Kun¹, Wang Long¹, Wang Chuanli²

(1. School of Mechanical Engineering, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China)

(2. Anhui Key Laboratory of Mine Intelligent Equipment and Technology, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China)

Abstract: A multi-scale study of the dynamic grain refinement behavior and residual stress state of copper induced by surface mechanical attrition treatment (SMAT) was carried out by developing a macro-micro coupled simulation method. The three-dimensional macro-scale finite element model of SMAT was developed firstly, and the refined grain size was calculated accordingly. According to the average grain size, the finite element model of polycrystals was created, the dislocation slip resistance resulted from the macro-scale finite element computation of SMAT was imported into the crystal plastic constitutive model, and the strain field outputted from the macro-scale finite element simulation was converted into the displacement boundary condition and was imposed on the finite element model of copper polycrystals. The crystal plastic finite element computation was then performed with respect to the present material hardening effect. The microstructure stress state and grain orientation distribution within a material point of the macro-scale finite element model of SMAT were resultantly investigated by the micro-scale finite element model of polycrystals. The obtained results show that, during the SMAT process, with the increasing of shot multi-directional impacts, the refined grain size decreases and both the macroscale and microscale surface compressive residual stresses increase. However, the non-uniformity of the grain orientation distribution increases at first and then decreases gradually.

Key words: surface mechanical attrition treatment; grain refinement; residual stress; dislocation density evolution; macro-micro coupled simulation