doi: 10. 11933 / j. issn. 1007-9289. 20220526001

基于位错密度理论的喷丸强化诱导 7050 铝合金 组织细化数值模拟^{*}

翟傲霜¹ 黄 啸¹ 王 欣² 许春玲² 商宏飞³
(1. 中国矿业大学(北京)机电与信息工程学院 北京 100083;
2. 中国航发北京航空材料研究院 北京 100095;
3. 清华大学摩擦学国家重点试验室 北京 100084)

摘要:7050 铝合金喷丸过程中微观组织演变机理及纳米化结构与工艺参数的关系还没有得到广泛研究。基于位错密度理论对 喷丸强化诱导 7050 铝合金表层晶粒细化进行研究。利用有限元方法模拟 7050 铝合金受单个和多个喷丸冲击过程,建立将喷 丸强化的有限元模型与累积塑性应变引起的位错密度演化模型相结合的混合数值模型,并利用遗传算法得到混合模型的数值 参数,用以预测喷丸强化层的位错密度和晶粒尺寸梯度分布,为研究喷丸强化 7050 铝合金的组织结构强化机理提供依据。 建立喷丸尺寸、速度和覆盖率等工艺参数与强化层内晶粒细化结构的物理联系和数量关系。结果表明,从单个喷丸冲击到大 量随机喷丸冲击过程都会在强化层内产生显著的晶粒细化;强化层内位错密度增加、晶粒细化的程度以及强化影响深度随着 喷丸覆盖率、速度、尺寸的增加而增加;较高的喷丸覆盖率和强度可生成纳米级晶粒结构表面层。综合运用 JC 本构有限元 模拟、四阶五级 RKF 算法解方程、遗传算法优化调参、概率约束方法控制随机喷丸以及 VUMAT 子程序定义本构关系,实 现 7050 铝合金喷丸强化微宏观联系的定量研究,可为设计 7050 铝合金喷丸工艺参数获得所需纳米结构提供理论依据。 关键词:喷丸强化;位错密度;晶粒细化;有限元;遗传算法 中图分类号: O733; O242; TG146; TG668

Numerical Simulation of Surface Grain Refinement of 7050 Aluminum Alloy Induced by Shot Peening Based on Dislocation Density Theory

ZHAI Aoshuang¹ HUANG Xiao¹ WANG Xin² XU Chunling² SHANG Hongfei³ (1. School of Mechanical Electronic & Information Engineering, China University of Mining & Technology, Beijing 100083, China;

2. AECC Beijing Institute of Aeronautical Materials, Beijing 100095, China;

3. State Key Laboratory of Tribology, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Microstructure evolution of 7050 aluminum alloy occurs during shot peening, allowing the surface grain to be refined to the nanometer level. However, the microstructural evolution mechanism of 7050 aluminum alloy and the relationship between its nanostructure and the shot-peening process parameters have not been widely studied. Therefore, based on dislocation density theory, the grain refinement of the 7050 aluminum alloy surface layer induced via shot peening was studied. First, the process of 7050 aluminum alloy impacted by single- and multiple-shot peening was simulated using the finite element method. A mixed numerical model was established, which combined the finite element model of shot-peening strengthening with the dislocation density evolution model caused by the cumulative plastic strain. Moreover, the flow stress of the target was obtained from the dislocation density evolution and Johnson–Cook (JC) constitutive relationships. The genetic algorithm was used to adjust the flow stress of the target to

^{*} 国家科技重大专项(J2019-VII-0015-0155)、国家自然科学基金(51705533)和中央高校基本科研业务费(2021YQJD23)资助项目。 Fund: Supported by National Science and Technology Major Project of China (J2019-VII-0015-0155), National Natural Science Foundation of China (51705533), and Fundamental Research Funds for the Central Universities of China (2021YQJD23). 20220526 收到初稿, 20220923 收到修改稿

be as consistent as possible so as to obtain the numerical parameters of the mixed model. Second, to simulate the shot-peening process of 7050 aluminum alloy more realistically, a three-dimensional finite element model based on probabilistic control of multiple-shot peening random impact target locations was established to consider the interaction between shots. Then, the dislocation density evolution constitutive model is embedded into the shot-peening finite element model to predict the gradient distribution of dislocation density and grain size in the shot-peening strengthened layer. This provides a basis for the study of the microstructure strengthening mechanism of shot-peening strengthened 7050 aluminum alloy. The grain size and dislocation density in the strengthened layer induced by single-shot peening, multiple-shot peening with a regular arrangement, and multiple-shot peening with a random distribution were simulated and calculated. The physical and quantitative relationships between the process parameters, such as shot-peening size, speed, and coverage, and the grain refinement structure in the strengthened layer were established. Additionally, the dynamic mechanical behavior (e.g., stress and strain rate) and microstructure (e.g., dislocation density and grain size) of the target during shot peening were studied. High strain rate plastic deformation of the target will occur owing to the projectile impact, which will lead to the evolution of the microstructure of the target. From a single shot-peening impact to multiple random shot-peening impact processes, grain refinement and dislocation density will significantly increase in the strengthened layer. However, lower shot-peening strength and coverage will not produce uniform nanostructures. The increase of dislocation density, degree of grain refinement, and depth of strengthening effect in the strengthened layer increase with the increase of shot-peening coverage, speed and size. Additionally, the grain refinement effect will be improved by the impact of adjacent projectiles and repeated impact of projectiles. Higher shot-peening coverage and strength will generate a surface layer with nano grain structure. The following methods are comprehensively used to establish a multi-scale 3D finite element model of shot-peening strengthened 7050 aluminum alloy and obtain the optimized material parameters of 7050 aluminum alloy in dislocation density theory: JC constitutive model for finite element simulation, four- and five-level Runge-Kutta-Fehlberg algorithm for solving the equations, genetic algorithm for optimizing the parameter adjustment, probabilistic constraint method for controlling the random shot peening, and VUMAT subroutine for defining the constitutive relations. The model takes the shot-peening process parameters as input and outputs of the stress and strain. The processes for strain rate, dislocation density, and grain size changes enabled the quantitative study of the micro-macro relationship of 7050 aluminum alloy shot-peening strengthening. This provides a theoretical basis for the design of 7050 aluminum alloy shot-peening process parameters to obtain the required nanostructures.

Keywords: shot peening; dislocation density; grain refinement; finite element method; genetic algorithm

0 前言

喷丸强化技术是一种金属材料表面处理工艺, 喷丸设备通过加速大量微小弹丸冲击材料表面,诱 导材料表面产生塑性变形和残余应力,产生加工硬 化效应^[1]。金属材料在实际服役过程中发生频率最 高、危害性最大的断裂模式是疲劳断裂,喷丸强化 工艺主要用于改善材料的疲劳性能,广泛应用于航 空航天、车辆船舶等领域^[2]。喷丸强化机理主要是 残余应力强化机制和组织结构强化机制^[2],前者是 由表层发生不均匀弹塑性变形产生残余应力,残余 压应力可以抑制和阻碍表面裂纹的萌生和扩展,后 者是由弹丸高速冲击使材料表层发生循环塑性变 形,造成材料表层显微组织结构发生变化^[2-3]。 POUR-ALI, KUMAR 等^[4-5]在喷丸处理的材料表面 观察到位错滑移和晶粒细化,利用剧烈喷丸技术制 备了梯度分布的纳米晶表面层。KUMAR 等^[5]研究 发现,表面晶粒细化为纳米级会改变材料的断裂力 学行为,从而改善材料的疲劳断裂、微动疲劳、磨 损和腐蚀等性能。因此许多学者通过试验和模拟进 行了喷丸引起晶粒细化的研究^[6-8]。

已有研究表明,喷丸处理诱导材料表层晶粒细 化的效果与喷丸材料、大小、速度、角度、覆盖率 等工艺参数有关^[9-11]。与通过试验方法调整喷丸工 艺从而获得所需的纳米级表面层^[8]相比,数值模拟 方法可以大大节省成本和时间,便于研究人员优化 工艺参数。HASSANI-GANGARAJ等^[12]研究了喷丸 过程中晶粒细化机制,建立了一个多尺度数值模型 模拟 AISI4340 钢在喷丸过程中的微观组织演变规 律,该数值模型预测的 AISI4340 钢位错密度演化过 程和晶粒细化结果与试验相吻合。WANG等^[11]进行 了随机多喷丸冲击的参数化建模,将多尺度本构模 型与有限元模拟相结合,详细研究了喷丸工艺参数 对 AISI4340 钢晶粒细化的影响,当喷丸尺寸、速度 和覆盖率增大时,晶粒细化程度增加。

7050 铝合金被广泛用作航天航空领域大型构 件,相比于传统铝合金具有较好的强度和抗应力腐 蚀性能^[6],目前对于 7050 铝合金喷丸处理后组织形 貌的研究主要是试验方法。宋颖刚等^[6]采用喷丸技 术在 7050 铝合金表面制备出纳米结构表面层,利用 XRD、TEM、EBSD 等技术研究了喷丸后 7050 铝合 金的表层纳米结构,研究表明表面纳米化机理是由 于表面局部强烈塑性变形导致位错聚集。李永辉 等^[13]通过增压喷丸技术在 7050 铝合金表面制备了 纳米晶层,研究了喷丸强化对 7050 铝合金微观组织 的影响,表层纳米化可以提高表层显微硬度和耐磨 性能。但对于喷丸过程中7050铝合金晶粒细化与位 错密度演化的关系鲜有研究,且关于喷丸工艺参数 与7050铝合金纳米化表层之间的联系不够明确。本 文采用有限元模拟和算法相结合的方法, 建立一个 将喷丸冲击的宏观三维有限元模型和微观位错密度 演化模型相结合的多尺度数值模型,用以研究喷丸 过程中 7050 铝合金晶粒细化与工艺参数之间的关 系,预测将 7050 铝合金表层晶粒细化为纳米尺度 对应的喷丸工艺参数,进一步揭示 7050 铝合金喷丸 晶粒细化机理,指导 7050 铝合金喷丸表面纳米化 工艺。

1 数值模拟方法

利用 Abaqus 软件分别建立单个和多个喷丸冲 击的三维有限元模型,并将有限元模拟与位错密度 演化联系起来,以预测喷丸冲击诱导的晶粒细化。 建立单个喷丸冲击模型时靶材属性采用 JC 本构模 型,输出单元的应变和应变率等,代入 Matlab 求 解位错密度本构模型方程组,利用遗传算法求得 两种本构模型的流动应力差值最小的位错密度本 构模型的参数集。建立多个喷丸冲击模型时利用 VUMAT 用户材料子程序作为靶材属性,采用上 述位错密度本构模型参数集。研究喷丸工艺参数 对晶粒细化的影响,为优化工艺参数制备纳米级 表层提供参考依据。参数集优化及求解流程图如 图 1 所示。



图 1 参数优化及求解流程图



1.1 喷丸有限元模型

模拟所用 7050 铝合金化学成分 (质量分数) 见

表 1^[14]。7050 铝合金的固溶热处理温度为 471~ 482 ℃,在冷水中淬火,转移时间不大于 15 s,时 效处理制度为加热温度 116~126 ℃, 保温 3~5 h, 加热温度 158~168 ℃, 保温 24~26 h^[15]。喷丸采 用常规常温喷丸强化。

表1 7050 铝合金的化学成分 (质量分数) [14]

 Table 1
 Chemical composition of 7050 aluminum alloy

Composition	Zn	Cu	Mg	Zr	Others	Al
Mass fraction / wt.%	6.7	2.5	2.3	0.12	0.56	Balance

1.1.1 单个喷丸冲击

采用 Abaqus 有限元软件,建立单个喷丸冲击的 三维有限元模型如图 2 所示。待喷靶材尺寸为 3 mm × 3 mm×1.5 mm 的立方体,靶材底面约束所有自 由度,喷丸为半径 0.3 mm 的球体。采用 C3D8R 八 节点线性六面体减缩积分和沙漏控制的单元。中心 区域加密网格,受喷区域网格尺寸与凹坑直径之比 约 1:20^[16],最小网格尺寸为 14 μm。使用罚算法 定义接触属性,库仑摩擦因数为 0.2。在预定义场中 定义喷丸速度为 65 m/s,采用动力显式分析,结果 输出中包含时间增量、应力、塑性应变及应变率等。 弹丸定义为弹塑性材料,密度 7 850 kg/m³,屈服 应力 1.55 GPa,弹性模量 210 GPa, 泊松比 0.3。为 了简单起见,将喷丸撞击靶材的角度设置为 90°, 因为垂直撞击是产生均匀残余应力的推荐入射角 度,偏离垂直冲击可能诱导局部多向塑性变形^[12]。



图 2 单个喷丸冲击有限元模型

Fig. 2 Finite element model of single shot peening impact

喷丸冲击过程中,应变率决定了残余应力大小、 分布以及塑性变形区状态^[17-18]。塑性变形时应力与应 变的关系称为本构方程。JOHNSON 和 COOK^[19]提出 一个流动应力的计算模型,其中包括应变硬化、应变 速率硬化和热软化的影响,JC 本构方程如下:

$$\sigma = \left(A + B\varepsilon^n\right) \left[1 + C\ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}\right)\right] \left[1 - \left(\frac{T - T_{\text{room}}}{T_{\text{melt}} - T_{\text{room}}}\right)^m\right] (1)$$

式中, σ 是材料的流动应力, ε 是材料变形时的等效塑性应变, $\dot{\epsilon}$ 和 $\dot{\epsilon}_0$ 分别表示材料的应变率和参考应变率, T、 T_{room} 、 T_{melt} 分别为材料发生变形时的温

度、参考温度和熔化温度, *A* 为材料初始屈服应力, *B* 和 *n* 是描述硬化系数和指数的常数, *C* 和 *m* 分别 是描述流动应力对应变速率和温度敏感性的常数。

采用 JC 本构模型定义靶材的属性。由于喷丸强 化过程中温度几乎不发生变化,所以忽略了热效应的 影响。FU 等^[14]研究了 7050 铝合金高应变率冲击压缩 中流动应力与应变、应变率的关系,得到 7050 铝合 金 JC 方程参数如表2 所示。JC 本构方程可使用 Abaqus 软件自带的材料属性模块设置并求解出来。

表 2 7050 铝合金 Johnson-Cook 模型参数^[14]

Table 2 Johnson-Cook model parameters of

7050 aluminum alloy^[14]

A / MPa	B / MPa	п	С	т	έ ₀ / (1 / s)	T _{melt} / ℃
435.7	534.624	0.504	0.019	0.97	1	635

Note: A is the initial yield stress of the material; B is the hardening modulus of the material; n is the hardening index of the material; C is the constant describing the sensitivity of the flow stress to the strain rate; m is the constant describing the sensitivity of the flow stress to temperature; $\dot{\varepsilon}_0$ is the reference strain rate; T_{melt} is the melting point temperature of the material.

1.1.2 多个喷丸冲击

建立规则排列的弹丸冲击和大量随机弹丸冲击 的有限元模型。规则排列的弹丸冲击由 1.1.1 节中单 个弹丸阵列装配而成,模型如图 3 所示,用以研究 靶材同一位置受力变形和晶粒细化随弹丸撞击次数 的变化,以及邻近弹丸冲击的影响。



图 3 规则排列的弹丸冲击有限元模型 Fig. 3 Finite element model of regularly arranged projectile impact

为更真实地模拟喷丸强化过程,建立一个基于 概率控制多弹丸冲击靶面位置的三维喷丸有限元模 型。为消除剧烈喷丸时应力波在靶材边界产生反射 回弹影响结果精度,在靶材四周和底部装配一层无 限元 CIN3D8 单元,使得模型具有无限边界^[20-21], 如图 4 所示。



图 4 随机弹丸冲击有限元模型

Fig. 4 Finite element model of random projectile impact

喷丸覆盖率是喷丸区域与总区域的比值,以百分比表示,用 Avrami 方程来评估喷丸覆盖率^[22]:

$$C = 100\% \times [1 - \exp(-\pi r^2 Rt)]$$
(2)

式中, C表示喷丸覆盖率, r表示喷丸凹坑的半径, R为每个单位区域凹坑的生成率, t表示喷丸时间。 一般将98%喷丸覆盖率视为100%完全覆盖, 200% 喷丸覆盖率定义为达到100%喷丸覆盖率所需时间

的两倍,并依次类推。

在实际喷丸过程中,弹丸在空间上并不是完全随机分布的,因此,使用概率控制弹丸随机分布,即弹丸之间彼此的时空位置不能重叠,弹丸分布函数如式(3)所示^[23]:

$$P = \begin{cases} 100\% \times \frac{l}{2r} & l \le 2r \\ 100\% & l > 2r \end{cases}$$
(3)

式中, P 为凹坑生成的概率, l 为随机生成的凹坑中 心与之前凹坑中心的距离。如果 l=0, 即新生成的 凹坑与之前的凹坑完全重叠,则概率为零 (P=0), 即禁止新生成凹坑。如果 l>2r,即新生成的凹坑完 全超出之前的凹坑,则概率为 1 (P=1),允许生 成新的凹坑。否则,如果为 0<l≤2r,新的凹坑产 生的概率由分布函数式 (3) 控制。

将上述随机概率控制过程使用 Python 脚本对 Abaqus 进行二次开发可完成模型创建,具体开发过 程见文献[23-24]。由于弹丸数量多,在脚本中增加 了 Abaqus 中弹丸与靶材相互作用时录制的宏,将弹 丸数量、半径、速度、冲击区域范围等写为用户输 入数据,可完成自动化模拟,便于更改工艺参数时 一键操作完成整个模拟。

1.2 位错密度演化模型

1.2.1 理论模型

金属的塑性变形依赖于应变率,它被普遍认为 是与金属的晶格缺陷,主要是位错的产生、运动、 相互作用和累积有关,所以位错与各种障碍及其自 身的相互作用影响着金属的流动应力^[25]。金属的塑 性变形程度依赖于应变率和应变速率,ESTRIN 等^[26]研究了多种应力水平下的晶体的应变硬化过程,提出一个位错密度模型,由两个微分方程耦合组成,用于预测晶胞内和晶胞壁位错密度的演化。 HASSANI-GANGARAJ等^[12]对上述位错密度模型 进行改进,将位错演化与材料的流动应力结合起来, 建立位错密度本构模型中初始参数优化的方法,并 通过 TEM 验证该模型预测高应变率硬化下的位错 密度和晶粒尺寸的可靠性。采用该模型对喷丸过程 中的晶粒细化进行评价。

在该模型中,位错胞结构包括胞壁和胞内两部 分。胞壁 ρ_w 和胞内 ρ_c 的位错密度的演化遵循不同 的规则^[26]:

$$\frac{d\rho_{c}}{dt} = \alpha^{*} \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\sqrt{\rho_{w}}}{b} \dot{\gamma}^{r} - \beta^{*} \frac{6\dot{\gamma}^{r}}{bd(1-f)^{1/3}} - k_{c} \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0}}\right)^{-1/n_{c}} \rho_{c}$$

$$\frac{d\rho_{w}}{dt} = \frac{6\beta^{*} \dot{\gamma}^{r} (1-f)^{2/3}}{bdf} + \frac{\sqrt{3}\beta^{*} \dot{\gamma}^{r} (1-f) \sqrt{\rho_{w}}}{fb} - k_{w} \left(\frac{\dot{\gamma}^{r}}{\dot{\gamma}_{0}}\right)^{-1/n_{w}} \rho_{w}$$
(4)

式(4)、(5)右边第一项表示由 Frank-Read 源的激活而引起的位错产生,第二项表示胞内的位 错转移到胞壁,最后一项表示塑性变形时位错的湮 灭导致位错密度动态平衡。参数 α^* 、 β^* 、 k_c 、 k_w 为位错形成和湮灭相关的常数, n_c 、 n_w 为温度相关 的参数。由于喷丸是一种冷处理过程,因此 n_c 、 n_w 假定为常数。参数 b 表示伯氏矢量的模长, γ' 是分 解的剪切应变, $\dot{\gamma}_0$ 为分解的参考剪切应变率,d为 晶粒大小,f为位错胞壁的体积分数。考虑了位错壁 的体积分数,总位错密度可以表示为胞壁和胞内位 错的加权和^[10,26]:

$$\rho_t = f \rho_w + (1 - f) \rho_c \tag{6}$$

$$f = f_{\infty} + (f_0 - f_{\infty}) \exp(\gamma^r / \tilde{\gamma})$$
(7)

参数 f_0 和 f_a 分别为f的初始值和饱和值。 $\tilde{\gamma}$ 是 一个衡量f下降率的常数。平均晶粒尺寸与总位错 的关系表示为^[26]:

$$d = \frac{K}{\sqrt{\rho_{\rm t}}} \tag{8}$$

式中, *K* 是一个取决于累积塑性应变的参数, 随总 位错密度的增加而迅速减少^[26]:

$$K = K_{\infty} + (K_0 - K_{\infty}) \exp(-\beta \gamma^r)$$
 (9)

式中,K₀和K_∞分别为K的初始状态值和饱和值。

为了将上述位错相互作用与材料的力学行为联

系起来,将材料的流动应力表示为两项之和[12]:

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_2 \tag{10}$$

式中, σ_1 表示一个与应变无关的应力,该应力源于 位错滑移阻力,与位错间相互作用无关。该应力可 根据变形前材料的屈服应力来估算。事实上,这个 σ_1 与式(1)中的 *A* 起着相同的作用,下一节将详 细讨论式(10)与式(1)的一致性,介绍位错密度 演化模型中参数优化的方法^[12]。 σ_2 来源于位错间相 互作用,且与应变和应变率相关。通过泰勒系数, 分解剪切应力和剪切应变率可与 σ_2 和等效应变率 相关^[26]:

$$\tau^r = \frac{\sigma_2}{M} \tag{11}$$

$$\dot{\gamma}^r = M\dot{\varepsilon} \tag{12}$$

式中,分解剪应力 r' 描述位错胞结构的力学行为, 与胞壁和胞内的剪应力有关。剪应力是通过应用混 合规则得到的^[26-27]:

$$\tau^{r} = f \tau_{w}^{r} + (1 - f) \tau_{c}^{r}$$
(13)

将这些分解剪应力与其相应的位错密度联系起来,就形成一组方程^[26-27]:

$$\tau_{\rm w}^r = \alpha G b \sqrt{\rho_{\rm w}} \left(\frac{\dot{\gamma}^r}{\dot{\gamma}_0}\right)^{1/m^2} \tag{14}$$

$$\tau_{\rm c}^{r} = \alpha G b \sqrt{\rho_{\rm c}} \left(\frac{\dot{\gamma}^{r}}{\dot{\gamma}_{\rm 0}}\right)^{1/m^{*}}$$
(15)

式中, α 为常数,G为剪切模量, $1/m^*$ 为应变速率 敏感性指数。 因此,该模型可以将塑性应变与位错演化联系 起来,并考虑塑性变形时应变、应变率和位错密度 对材料流动应力的贡献。

1.2.2 最佳输入参数集

式 (4) ~ (15) 构成包含隐式微分方程的复杂 非线性方程组,使用 Matlab 软件可求解。将式(4)~ (15) 写为 Matlab 函数程序,求解大致过程如下: 首先利用 1.1.1 节所建模型从 Abaqus 软件中提取到单 元的应变和应变率等随时间变化,提取出 $\dot{\gamma}_0$ 约为 0.35 ×10⁶, γ' 为 0.03, $\dot{\epsilon}$ 为 0.2×10⁶, ϵ 为 0.07; 然后利 用 Matlab 软件四阶五级 Runge-Kutta-Felhberg 算法^[28-29] 求出 ρ_c 、 ρ_w 、 ρ_t 和 d 的数值解,该数值解为 n 行 4 列的矩阵 (n 与定义的求解步长总时间有关);利用 1.1.1 节所建模型从 Abaqus 软件中提取单元塑性变形 所用时长约为 1.6 µs,定位该总时长所在的该行矩阵为 所要求解的 ρ_c 、 ρ_w 、 ρ_t 和 d 的终值。

b、M、α、G、fo、f_a、 $\dot{\gamma}_0$ 、K₀、K_a、 $\tilde{\gamma}$ 、β、 $\rho_c^{t=0}$ 、 $\rho_w^{t=0}$ 作为材料的初始参数值; α^{*}、 β^* 、k_c、 k_w、n_c、n_w、m^{*}作为使有限元 JC 本构求得的流动应 力值(式(1))与位错密度演化本构求得的流动应 力值(式(10))相一致的参数集^[12]。将两种本构 得出的流动应力值的差值的绝对值作为目标函数, 使用 Matlab 软件遗传算法进行全局最小化优化来实 现最佳的输入参数集,最终得出的最佳参数集见 表 3 和表 4。综合考虑运算效率与精确性,采用 100 次遗传迭代计算最优解,该参数集最终使得流动应 力的差值绝对值约 2×10⁻²⁵ MPa,如图 5 所示为每 代最佳适应度值变化图。

表 3	位错密度演化模型中 7050 铝合金的	优化材料参数
100		10101011 2 28

Table 3 Optimization material parameters of 7050 aluminum alloy in dislocation density evolution model

Tuned parameter	α^{*}	β^{*}	$k_{ m c}$	$k_{ m w}$	n _c	n _w	m^*	
Value	0.057	0.018	39.90	63.67	57.47	69.29	80.46	

Note: α^* is the proportion of moving dislocation sources in the total dislocation sources, β^* is the proportion of intracellular dislocations transferred to the cell wall when they occur, k_c and k_w are the relevant parameters of energy loss rate associated with the dynamic process of dislocation cross slip in the cell and cell wall during dislocation annihilation, n_c and n_w are the relevant parameters of the sensitivity of dislocation stack fault energy values in the cell and cell wall to temperature, and m^* is the reciprocal of the strain rate sensitivity index.

表 4 位错密度演化模型中 7050 铝合金的其他材料参数 Table 4 Other material parameters of 7050 aluminum alloy in dislocation density evolution model

Other parameter	<i>b</i> / nm	М	α	G / MPa	f_0	f_{∞}	$\dot{\gamma}_0$	K_0	K_{∞}	γ̈́	β	$ ho_{ m c}^{t=0}$ /mm $^{-2}$	$ ho_{\mathrm{w}}^{t=0}$ /mm ⁻²
Value	0.286	3.06	0.25	26429	0.25	0.06	107	70	1	3.2	0.26	10 ⁷	10 ⁸

Note: *b* is the size of the Bernstein vector, *M* is the Taylor factor, α is the empirical constant that relates the stress to the square root of the dislocation density, *G* is the shear modulus, f_0 is the initial value of the cell wall volume fraction *f* before the start of the shear strain, f_{α} is the saturation value that the cell wall volume fraction *f* before the start of the shear strain, f_{α} is the saturation value that the cell wall volume fraction *f* before the start of the shear strain, f_{α} is the saturation value that the cell wall coefficient that relates the dislocation density to the cumulative plastic strain, K_0 is the initial value of the proportional coefficient *K* before the onset of plastic strain, K_{α} is the saturation value reached when the proportional coefficient *K* decreases with the development of plastic strain, $\tilde{\gamma}$ is the constant representing the decline rate of *f*, β is the best fitting parameter in the fitting function relationship between *K* and decomposed shear strain, and $\rho_c^{t=0}$, $\rho_w^{t=0}$ are the initial dislocation densities in cells and cell walls before deformation.



Fig. 5 Variation diagram of optimal fitness value of genetic iteration

1.2.3 位错密度演化在靶材中的分布

剧烈喷丸冲击过程中应变率时程提取计算较 难,为了直观地在 Abaqus 中显示出不同深度处 晶粒尺寸和位错密度随冲击过程变化的结果云 图,开发用户材料子程序 VUMAT,将参数优 化后的位错密度演化本构方程嵌入到 Abaqus 显式分析中。

2 结果与讨论

2.1 单个喷丸冲击的晶粒细化

半径为 0.3 mm 的弹丸以 65 m/s 速度垂直单次 冲击 7050 铝合金引起的残余应力、等效塑性应变、 总位错密度和晶粒尺寸的分布如图 6 所示。根据所 选的初始位错密度参数,计算出初始晶胞尺寸约为 12.2 μm。单次冲击后晶粒细化为约 2.6 μm,位错密 度增加约两个数量级。最大等效塑性应变、最大位 错密度、最小晶粒约在同一位置,即弹丸冲击产生 的凹坑表面下方约 40 μm 处。由此可见,单次冲击 产生了显著的晶粒细化,但单次冲击不会产生均匀 的纳米结构层。



图 6 单个喷丸冲击后的结果

Fig. 6 The results of single shot peening impact

四阶五级 RKF 算法求解位错密度本构方程组时, 求解出不定步长时间对应的晶粒尺寸,图 7 显示了单 个弹丸 65 m/s 冲击速度时最小晶粒尺寸随时间的演 化,可以看出晶粒细化随碰撞时间不断发展。图 8 显 示了单个弹丸冲击后的最小晶粒尺寸与速度关系,可 以看出晶粒细化程度随着速度的增加而增加。



2.2 多个喷丸冲击的晶粒细化

图9显示了撞击同一位置的弹丸个数n、尺寸r、 速度 v 与最小晶粒尺寸 d 的关系,可以看出,撞击 次数越多,速度越大,弹丸尺寸越大,晶粒细化越 显著,且速度是对晶粒细化影响最显著的因素。当 弹丸如图 3 呈 4 列每列 15 个撞击时,半径 0.3 mm, 速度 80 m/s 时得到最小晶粒尺寸 493 nm,影响区 平均晶粒尺寸约 1.4 μm, 而相同尺寸和速度的弹丸 呈单列共15个撞击时,获得533 nm的最小晶粒尺 寸和 1.6 μm 的平均晶粒尺寸, 说明邻近弹丸冲击的 影响会提高晶粒细化作用, 且邻近弹丸冲击的作用 使得晶粒细化影响区域宽度变大,如图 10 所示。如 图 11 所示,当4 列每列 15 个弹丸的撞击速度增大 到100m/s时,靶材表面平均晶粒尺寸进入纳米级, 约为 290 nm, 晶粒细化明显的区域深度约为 1.3 mm, 表层 300 µm 深度范围内的平均晶粒尺寸 约为 0.6 µm, 由此可见, 喷丸速度增大会加深晶粒 细化的范围。



图 9 单列弹丸冲击工艺参数对最小晶粒尺寸的影响

Fig. 9 Effect of impact process parameters of single row projectile on minimum grain size





Fig. 10 Grain refinement under impact of single row and four row projectiles(v=80 m/s)



弹丸的反复冲击会提高晶粒细化程度,在随机 弹丸冲击模型中,喷丸覆盖率会对晶粒细化产生影 响,图 12显示了喷丸半径 0.3 mm,速度 50 m/s时,不同覆盖率下的最小晶粒尺寸,随着喷丸覆盖率增大,最小晶粒尺寸减小。





如图 13 所示, 弹丸半径 0.3 mm, 速度 80 m/s, 当喷丸覆盖率在 100%时, 晶粒细化影响深度约为 50 μm, 凹坑表面晶粒尺寸虽然细化为纳米级, 但影 响深度内平均晶粒尺寸仍为微米级, 没有形成均匀 纳米结构层。当喷丸覆盖率在 200%, 速度 50 m/s 时, 晶粒细化影响深度约为 100 μm, 影响深度内平 均晶粒尺寸仍为微米级。



图 13 喷丸冲击区域晶粒尺寸分布图 (喷丸覆盖率 100%, r=0.3 mm, v=80 m/s) Fig. 13 Grain size distribution in shot peening impact area

(shot peening coverage is 100%, r=0.3 mm, v=80 m/s)

当喷丸速度为 70 m/s,覆盖率在 300%以上时, 喷丸表面和次表面的平均晶粒尺寸细化为纳米级, 纳米级结构表层深度约 70 μm。如图 14 所示,当喷 丸速度为 50 m/s,覆盖率在 500%以上时,喷丸表 面和次表面的平均晶粒尺寸细化为纳米级,形成均 匀的纳米表层,纳米级表层深度约 150 μm。沿靶材 深度方向提取路径,统计晶粒尺寸梯度分布,如 图 15 所示,随着表面到基体深度的增加,晶粒尺寸 逐渐增大。这与宋颖刚等^[6]通过喷丸工艺制备梯度 纳米结构表面层的结果相符合。



图 14 喷丸冲击区域晶粒尺寸分布图

(喷丸覆盖率为 500%, r=0.3 mm, v=50 m/s)

Fig. 14 Grain size distribution in shot peening impact area (shot peening coverage is 500%, r=0.3 mm, v=50 m/s)



3 结论

(1) JC 本构方程与位错密度本构方程均能描述 高应变率材料的塑性应力应变关系,基于两者对流 动应力预测的一致性,可实现位错密度本构方程的 优化调参。

(2)使用基于位错密度理论建立的喷丸强化 7050 铝合金的混合数值模型,可直观显示出靶材的 动态力学行为(应力、应变率等)变化及微观结构 (位错密度、晶粒尺寸等)演变。位错演化机理与塑 性应变过程中流动应力变化有关,位错演化与塑性 应变相互适应。

(3)喷丸冲击造成靶材的高应变率塑性变形, 诱导靶材表面和次表面产生了晶粒细化和位错密度 增加。改变喷丸工艺参数会改变晶粒尺寸和分布, 较高的喷丸强度和覆盖率可得到梯度纳米结构层。

参考文献

[1] MAHMOUDI A, GHASEMI A, FARRAHI G, et al. A comprehensive experimental and numerical study on

redistribution of residual stresses by shot peening[J]. Materials & Design, 2016, 90: 478-487.

- [2] 王仁智. 金属材料的喷丸强化原理及其强化机理综述[J]. 中国表面工程, 2012, 25(6): 1-9.
 WANG Renzhi. Review of shot peening strengthening principle and strengthening mechanism of metal materials[J]. China Surface Engineering, 2012, 25(6): 1-9. (in Chinese)
- [3] 王仁智,汝继来.喷丸强化的基本原理与调控正/切断 裂模式的疲劳断裂抗力机制图[J].中国表面工程, 2016,29(4):1-9.

WANG Renzhi, RU Jilai. Basic principle of shot peening and mechanism diagram of fatigue fracture resistance regulating normal / tangential fracture mode[J]. China Surface Engineering, 2016, 29(4): 1-9. (in Chinese)

- [4] POUR-ALI S, KIANI-RASHID A, BABAKHANI A. Surface nanocrystallization and gradient microstructural evolutions in the surface layers of 321 stainless steel alloy treated via severe shot peening[J]. Vacuum, 2017, 144: 152-159.
- [5] KUMAR K, SURESH S, CHISHOLM M, et al. Deformation of electrodeposited nanocrystalline nickel[J]. Acta Materialia, 2003, 51(2): 387-405.
- [6] 宋颖刚,王欣,王强.7050 铝合金表面喷丸强化层内纳
 米结构微观组织结构分析[J]. 电子显微学报,2015, 34(1): 18-24.

SONG Yinggang, WANG Xin, WANG Qiang. Microstructure analysis of nanostructure in 7050 aluminum alloy surface shot peening strengthening layer[J]. Journal of Chinese Electron Microscopy Society, 2015, 34(1): 18-24. (in Chinese)

- [7] BAGHERIFARD S, SLAWIK S, FERNANDEZ-PARIENTE I, et al. Nanoscale surface modification of AISI316L stainless steel by severe shot peening[J]. Mater Design, 2016, 102: 68-77.
- [8] DAI S, ZHU Y, HUANG Z. Microstructure and tensile behaviour of pure titanium produced after high-energy shot peening[J]. J Mater Sci Technol, 2016, 32(13): 1323-1329.
- [9] BAGHERIFARD S, GUAGLIANO M. Fatigue behavior of a low-alloy steel with nanostructured surface obtained by severe shot peening[J]. Engineering Fracture Mechanics, 2012, 81: 56-68.
- [10] LIN Q, LIU H, ZHU C. Effects of different shot peening parameters on residual stress, surface roughness and cell size[J]. Surface & Coatings Technology, 2020, 398, 126054.
- [11] WANG C, WANG L, WANG X, et al. Numerical study of

grain refinement induced by severe shot peening[J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2018, 146-147: 280-294.

- [12] HASSANI-GANGARAJ S, CHO K, VOIGT H, et al. Experimental assessment and simulation of surface nanocrystallization by severe shot peening[J]. Acta Materialia, 2015, 97: 105-115.
- [13] 李永辉, 吉文哲, 王守忠. 喷丸强化对 7050 铝合金微 观组织和耐磨性的影响[J]. 材料保护, 2017, 50: 18-21.
 LI Yonghui, JI Wenzhe, WANG Shouzhong. Effect of shot peening on Microstructure and wear resistance of 7050 aluminum alloy [J]. Materials protection, 2017, 50: 18-21. (in Chinese)
- [14] FU X, AI X, WAN Y, et al. Flow stress modeling for a eronautical aluminum alloy 7050-T7451 in high-speed cutting[J]. Transactions of Nanjing University of Aeronautics & Astronautics, 2007, 24(2): 139-144.
- [15] 王祝堂. 航空航天器用铝材手册[M]. 长沙:中南大学 出版社, 2015.
 WANG Zhutang. Handbook of Alumium applications in aviation spacecraft[M]. Changsha: Central South University Press, 2015. (in Chinese)
- [16] BAGHERIFARD S, GHELICHI R, GUAGLIANO M. Mesh sensitivity assessment of shot peening finite element simulation aimed at surface grain refinement[J]. Surface and Coating Technology, 2014, 243: 58-64.
- [17] MEGUID S, SHAGAL G, STRANART J. 3D FE analysis of peeing of strain-rate sensitive materials using multiple impingement model[J]. International journal of impact engineering, 2002, 27(2): 119-134.
- [18] 陈飞. 航空铝合金弓形结构框喷丸强化变形仿真分析 与 ABAQUS 二次开发[D]. 成都: 西南交通大学, 2020. CHEN Fei. Simulation analysis of shot peening strengthening deformation of aviation aluminum alloy bow structure frame and secondary development of ABAQUS[D]. Chengdu: Southwest Jiaotong University, 2020. (in Chinese)
- [19] JOHNSON G R, COOK W H. Constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures[J]. Engineering Fracture Mechanics, 1983, 21: 541-548.
- [20] 王成,王龙. 高温喷丸强化 Ti6Al4V 合金的热力耦合 数值模拟[J]. 中国表面工程, 2019, 32(2): 143-153.
 WANG Cheng, WANG Long. Thermo-mechanical coupled simulation of warm shot peening of Ti6Al4V alloy[J]. China Surface Engineering, 2019, 32(2): 143-153.

(in Chinese)

[21] 何浩然, 刘峰, 李恒智, 等. 喷丸处理 Q235 钢中晶粒 尺寸与残余应力的关系预测[J]. 中国表面工程, 2021, 34(2): 49-58.

HE Haoran, LIU Feng, LI Hengzhi, et al. Prediction of relationship between grain size and residual stress in shot peening Q235 steel[J]. China Surface Engineering, 2021, 34(2): 49-58. (in Chinese)

- [22] ASTARAEE A, MIRESMAEILI R, BAGHERIFARD S, et al. Incorporating the principles of shot peening for a better understanding of surface mechanical attrition treatment (SMAT) by simulations and experiments[J]. Materials & Design, 2017, 116: 365-373.
- [23] 王成,李开发,姚尚成,等. 喷丸强化 Ti6Al4V 钛合金 的数值模拟[J]. 航空动力学报, 2021, 36(3): 449-457. WANG Cheng, LI Kaifa, YAO Shangcheng, et al. Numerical simulation of shot peening strengthening Ti6Al4V titanium alloy[J]. Journal of Aerospace Power, 2021, 36(3): 449-457. (in Chinese)
- [24] 王鹰宇. Abaqus 用户手册[M]. 北京: 机械工业出版社, 2017.

WANG Yingyu. ABAQUS User's Manual[M]. Beijing: China Machine Press, 2017. (in Chinese)

[25] 闫洪霞. 基于位错物理的金属塑性变形本构关系的研 究[D]. 杭州:浙江大学, 2011.

YAN Hongxia. Study on constitutive relationship of metal

plastic deformation based on dislocation physics[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2011. (in Chinese)

- [26] ESTRIN Y, TOTH L, MOLINARI A, et al. A dislocation-based model for all hardening stages in large strain deformation[J]. Acta Materialia, 1998, 46: 5509-5522.
- [27] LAPOVOK R, TORRE F, SANDLIN J, et al. Gradient plasticity constitutive model reflecting the ultrafine micro-structure scale: the case of severely deformed copper[J]. Journal of the Mechanics and Physics of solids. 2005, 53: 729-747.
- [28] 薛定宇. 高等应用数学问题的 MATLAB 求解[M]. 北 京:清华大学出版社,2021. XUE Dingyu. Advanced applied mathematical problem solutions with Matlab[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2021. (in Chinese)
- [29] 柯艺芬. 非线性方程组迭代解法[M]. 北京: 电子工业 出版社, 2021.

KE Yifen. Iterative solution of nonlinear equations[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2021. (in Chinese)

作者简介:翟傲霜,女,1994年出生,硕士。主要研究方向为表面工 程与应力模拟。

E-mail: zhaiaoshuang@foxmail.com

黄啸(通信作者),男,1988年出生,博士,讲师。主要研究方向为表 面工程与应力模拟。

E-mail: hx@cumtb.edu.cn