

## 粗晶粒 Al 多晶试件拉伸变形局部化的数值模拟\*

李剑荣 王曦 虞吉林

(中国科学技术大学力学和机械工程系, 合肥 230026)

**摘要** 采用二维随机有限元法 (SFEM) 模拟了准静态拉伸载荷下具有随机不均匀材料属性的粗晶粒 Al 多晶试件的力学响应。模型考虑了晶粒的弹性各向异性和由于位错不均匀分布引起的晶粒屈服强度的差异, 探讨了晶粒屈服强度分布及其样本差异对试件力学响应的影响。

**关键词** 非均质材料, 多晶体, 宏/细观力学行为, 变形局部化, 数值模拟

**中图分类号** TG113.25

**文献标识码** A

**文章编号** 0412-1961(2001)07-0717-06

### NUMERICAL SIMULATION OF DEFORMATION LOCALIZATION IN COARSE-GRAINED ALUMINUM SPECIMENS

LI Jianrong, WANG Xi, YU Jilin

Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026

Correspondent: YU Jilin, professor, Tel: (0551)3602779, Fax: (0551)3637341, E-mail: jlyu@ustc.edu.cn

Manuscript received 2000-11-06, in revised form 2001-03-09

**ABSTRACT** The mechanical responses of coarse-grained polycrystalline aluminum specimens with random heterogeneity of material parameters under quasi-static tensile load are simulated by two-dimensional stochastic finite element method (SFEM). Elastic anisotropy of single crystal and differences of the initial yield stress induced by inhomogeneous distribution of dislocations are considered in the model. The influence of the yield stress distribution and sample differences on the mechanical response of the specimen is analyzed.

**KEY WORDS** heterogeneous material, polycrystal, macro- and meso-mechanical behavior, deformation localization, numerical simulation

许多细观实验<sup>[1,2]</sup>表明,粗晶粒 Al 或 Al 合金试件在拉伸载荷下的变形条纹甚至在弹性阶段就是不均匀的。用散斑方法观察到一种被称为奇异带<sup>[1]</sup>或者白带<sup>[2]</sup>的明显的带状结构。在文献<sup>[1]</sup>中,平均晶粒尺寸为 1 和 2 mm 的 Al 多晶体试件承受了准静态拉伸加载,试件变形的特征如下: (1) 在初始阶段变形就是不均匀的,呈块状分布; (2) 在每块中(除边界处)变形是基本均匀的; (3) 这些模块被奇异带分割,它们对应于位错理论中的变形带,奇异带中发生大变形; (4) 随着变形发展,块的大小和位置在变化; (5) 在塑性变形的末期只有两块占主导地位。当试件中心的应变达到 4.5% 时试件断裂,且断裂发生在奇异带或者在其边界。

单个晶粒具有结晶各向异性和对称性,当它们形成多

晶聚集体且随机取向时,材料便表现为宏观各向同性。晶体的塑性变形主要通过位错滑移进行,而位错的分布和发展非常不均匀<sup>[3]</sup>。多晶体的变形在本质上是不均匀的,即每个晶粒的行为不同,甚至同一晶粒不同部位也不同<sup>[4]</sup>。

为研究晶体细观不均匀性对宏观变形特别是局部化失稳的影响,本文采用随机有限元法 (SFEM) 模拟粗晶粒 Al 多晶试件在准静态拉伸变形下的变形过程。模型中考虑了单晶的各向异性和位错不均匀分布引起的屈服强度的空间差异。探讨了晶粒分布的样本差异和晶粒屈服强度的空间不均匀分布对试件宏观力学响应的影响。

#### 1 模型

##### 1.1 材料属性

Al 为面心立方 (fcc) 晶体,其单晶体的弹性常数<sup>[5]</sup>为:  $C_{11}=108.2$  GPa,  $C_{12}=61.3$  GPa,  $C_{44}=28.5$  GPa,  $2C_{44}/(C_{11}-C_{12})=1.22$ 。其中,  $2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$  表示了材料的弹性各向异性。Al 单晶体的各向异性很小。

\* 中国科学院“九五”基础研究重大项目 KJ 951-1-201 资助  
收到初稿日期: 2000-11-06, 收到修改稿日期: 2001-03-09  
作者简介: 李剑荣, 男, 1975 年生, 博士生

fcc 金属单晶体中常见的剪应力 - 剪应变曲线<sup>[6-9]</sup>可以划分为 I, II, III 阶段, 如图 1 所示. 这 3 个阶段的应变硬化率  $d\tau/d\gamma$  分别为  $\theta_I, \theta_{II}$  和  $\theta_{III}$ , 第 I 阶段为易滑移段, 位错运动的方式为主滑移, 应变硬化率  $\theta_I$  很低; 第 II 阶段的硬化率  $\theta_{II}$  较高,  $\theta_{II}/G \approx 1/300$  ( $G$  是剪切模量), 位错运动出现次滑移; 第 III 阶段的硬化率  $\theta_{III}$  随应变增加而持续下降, 对应的位错运动非常复杂. 而 Al 在室温及室温以上只显示出萎缩的第 II 和第 III 阶段, 未出现第 I 阶段.

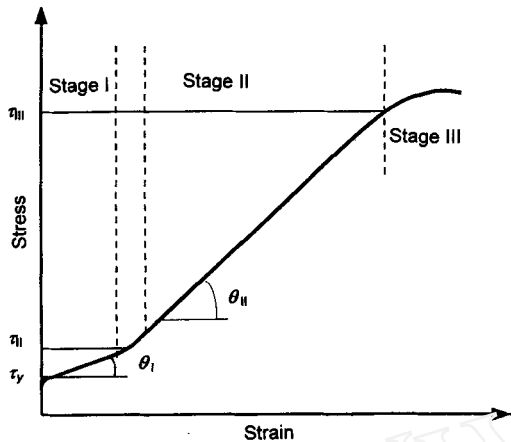


图 1 单晶体的剪应力 - 剪应变关系

Fig.1 Shear stress-strain curve for a single crystal

fcc 金属多晶体的应力 - 应变关系可表示为<sup>[10]</sup>

$$\varepsilon = [(\sigma - \sigma_0)/h]^2 \quad (1)$$

式中,  $\varepsilon$  为应变;  $\sigma$  为真应力;  $\sigma_0$  为屈服应力;  $h$  为材料参数, 290 K 时 Al 的  $h$  值为 40 MPa.

在材料的应变过程中, 累积的位错有两个来源<sup>[11]</sup>, 即晶体中不同部分之间应变协调的需要以及位错的随机互相捕获, 分别称之为几何必需位错和统计贮存位错. 如果只考虑几何必需位错, 则得到下式

$$\tau = \tau_0 + C'G\sqrt{b\bar{\varepsilon}/D} \quad (2)$$

式中,  $\tau$  为流动应力,  $\tau_0$  为其它因素对流动应力的贡献,  $C'$  为常数,  $G$  为剪切模量,  $b$  为 Burgers 矢量的模,  $\bar{\varepsilon}$  为平均应变,  $D$  为晶粒尺寸.

实验发现<sup>[12]</sup>, 多晶体试件中晶粒内部变形主要是单滑移. 而为了同相邻晶粒的变形相协调, 在靠近晶界两端的区域晶格是旋转的 (显示了简单剪切梯度), 发生了次滑移. Al 多晶体的自洽计算<sup>[13]</sup> 表明: 初始阶段每个单晶内只有一个滑移系是活跃的; 然后逐渐地更多的滑移系变得活跃. 因此, 多晶体拉伸试件中单个晶粒的变形图像可以近似地被看成成分两步进行: 开始由统计贮存位错引起整体平均的变形, 接着是由几何必需位错引起的局部不均匀

的变形. 由此, 对晶粒可以提出以下的应力 - 应变关系

$$\sigma = \begin{cases} E\varepsilon & (\varepsilon \leq \varepsilon_0^e) \\ \sigma_0^e + E_I(\varepsilon - \varepsilon_0^e) & (\varepsilon_0^e < \varepsilon \leq \varepsilon_{0I}^e) \\ \sigma_{0I}^e + k(\varepsilon - \varepsilon_{0I}^e)^{1/2} & (\varepsilon_{0I}^e < \varepsilon) \end{cases} \quad (3)$$

其中,  $E$  为弹性模量,  $E_I$  为强化第 I 阶段的应变硬化模量,  $\varepsilon_0^e$  和  $\sigma_0^e$  分别为屈服时的等效应变和应力,  $\varepsilon_{0I}^e$  和  $\sigma_{0I}^e$  分别为第 I 阶段结束时的等效应变和应力,  $k$  为材料参数.

图 2 即为多晶体中晶粒的应力 - 应变关系示意图.

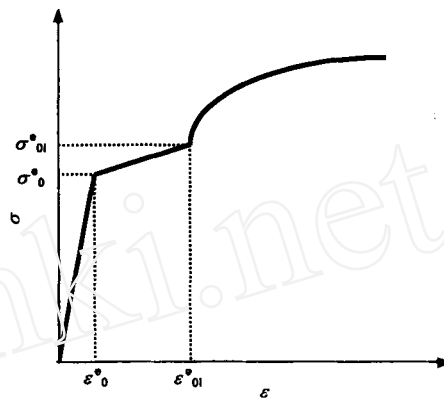


图 2 多晶体中晶粒的应力 - 应变关系

Fig.2 Stress-strain ( $\sigma - \varepsilon$ ) curve for an individual grain

## 1.2 有限元模型

粗晶粒的薄板小试件中晶粒的数目不是很大, 因此, 在变形中晶粒取向和屈服应力的差异可能会有较大的影响. 基于这种考虑, 本文假设: (1) 试件中只有一层晶粒, 处于平面应力状态, 晶粒为六边形且尺寸相同; (2) 单个晶粒的取向是随机的, 总体满足均匀分布, 即不同取向的晶粒数目近似相等且取向是对称的, 这样, 当晶粒数且很大时材料在宏观上呈各向同性; (3) 单个晶粒的屈服应力是随机的, 总体满足正态分布, 分布的均值是宏观材料的屈服应力, 单晶体的其它参数保持不变; (4) 晶粒取向与晶粒屈服应力的选取是独立的.

计算模型长为 34.0 mm, 宽为 7.5 mm. 模型的上、下边界自由; 左端  $x$  方向固定,  $y$  方向自由, 左下角点的  $y$  方向固定; 右端  $x$  方向逐渐被拉伸,  $y$  方向自由, 右下角点的  $y$  方向固定. 模型的晶粒尺寸约为 1.70 mm. 每个晶粒被分割成 4 个单元 (边界的晶粒可能只包含 1 或 2 个单元), 属于同一晶粒的 4 个单元具有相同的材料属性. 试件的有限元网格如图 3 所示.

立方晶系材料的弹性常数是  $90^\circ$  旋转对称的, 故在本模型中选用了 3 种晶粒取向, 分别与  $x$  方向成  $0^\circ$ ,  $30^\circ$  和  $60^\circ$ . 同一取向的晶粒数目近似相等. 晶粒的屈服应力

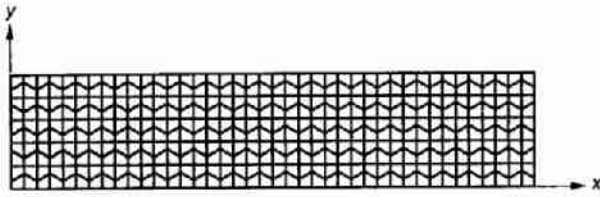


图3 模型网格图  
Fig.3 Finite element mesh

$\sigma_0$  是随机选取的, 总体满足正态分布, 分布的均值是宏观材料的屈服应力. 根据 Hall-Petch 关系 [14,15]

$$\sigma_0 = \sigma_f + kD^{-1/2} \quad (4)$$

式中,  $\sigma_f$  为使位错运动所需要的摩擦应力,  $k$  为经验参数,  $D$  为晶粒尺寸. Al 的  $\sigma_f = 15.69 \text{ MPa}$ ,  $k = 0.07 \text{ MN/m}^{3/2}$  [16], 屈服应力分布均值  $\bar{\sigma}_0$  取为  $17.4 \text{ MPa}$ .

在计算中, 先将晶粒按顺序编号, 把晶粒号与单元号

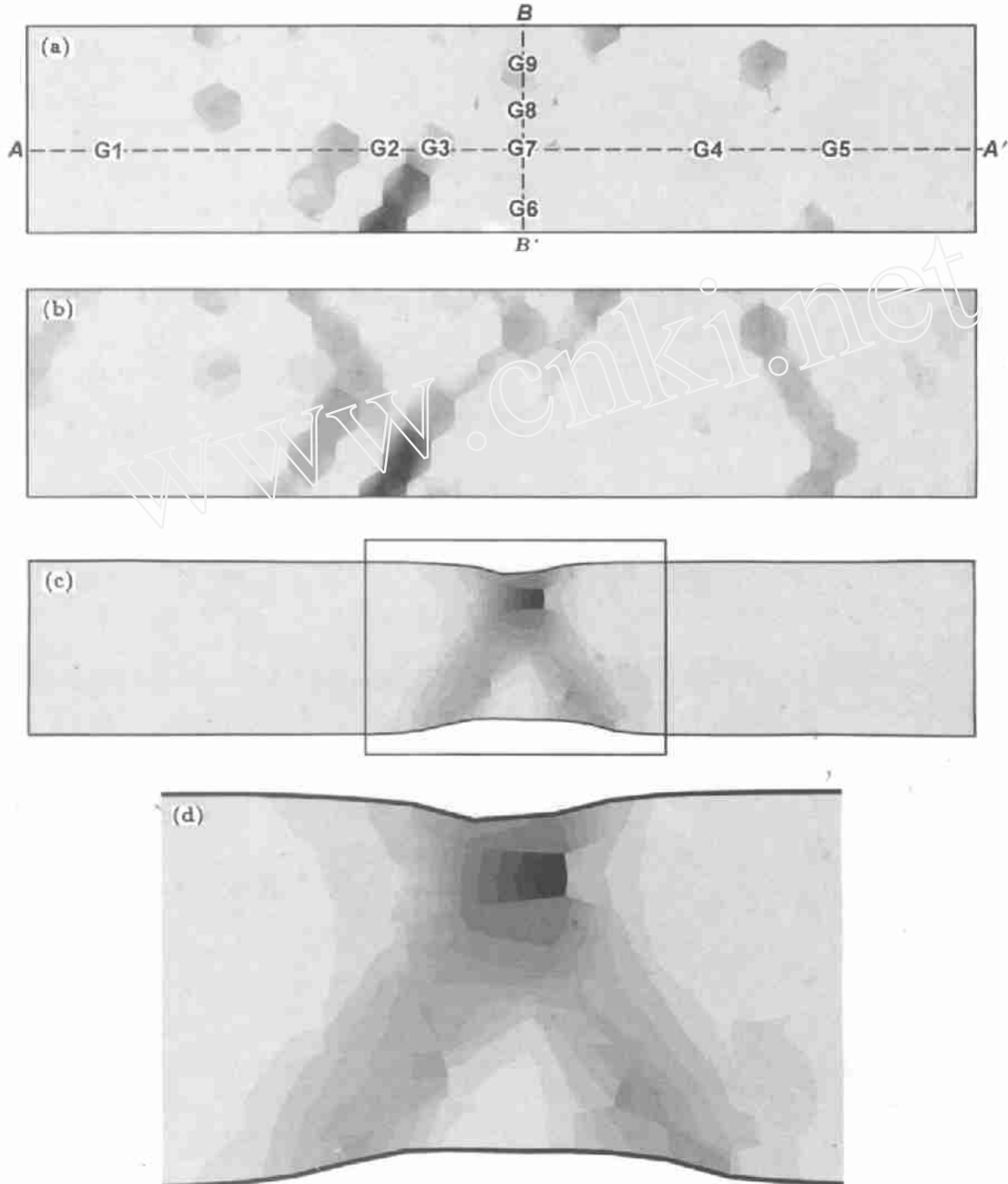


图4 拉伸分别为  $8 \mu\text{m}$ ,  $9.25 \mu\text{m}$  和  $16.2 \text{ mm}$  的塑性应变云图

Fig.4 Contours of the equivalent plastic strain for the specimen elongation of  $8 \mu\text{m}$  (a),  $9.25 \mu\text{m}$  (b),  $16.2 \text{ mm}$  (c) and magnified graph of the framed area in Fig.4c (d)

连系起来. 然后, 用程序生成随机的一个晶粒序列, 按照这个序列给单元赋以相应的材料属性, 得到了模型中晶粒分布的一个样本. 改变晶粒序列也就改变了模型中的晶粒分布. 有限元计算是用 ABAQUS/Standard V5.7 软件实现的.

## 2 计算结果和分析

### 2.1 晶粒屈服强度差异和各向异性的影响

计算得到了不同加载时刻塑性应变和纵向位移的不均匀分布. 图 4 显示了同一试件在不同伸长时的塑性应变分布 (图 4a, b, c 的缩放比例相同, 模型的晶粒尺寸为 1.7 mm, 屈服强度分布的方差  $s$  为 1 MPa). 从塑性应变分布图可以看出, 塑性应变先在局部区域出现 (图 4a 中距左端约 1/3 处的黑影区), 此后, 塑性应变的发展在其它区域也是不均匀的, 在图 4b 中, 距右端 1/5 处又出现了塑性应变带 (浅黑影区), 除这两区域外的其它地方变形均匀且很小. 最后, 在图 4c 中的黑框部分出现颈缩 (图 4d 为其放大图), 这说明试件的变形失稳前具有宏观均匀性和细观不均匀性, 而失稳后在宏观上也是不均匀的.

图 5 为平均晶粒尺寸为 2 mm 的 Al 试件散斑实验的  $x$  分量条纹图<sup>[1]</sup> (试件宽度为 7.4 mm). 在图 5a 中, 试件右端 1/3 处出现奇异条纹; 在图 5b 中上述奇异条纹依然存在, 但条纹方向有所改变.

应当指出的是, 在文献 [1,2] 报道的散斑实验中, 某一变形时刻前后两个散斑照相分别用作参考散斑和当前散斑. 用这种方法得到的条纹是这个时间间隔的应变增量的分布, 而不是应变本身. 如用散斑方法来分析本次模拟

实验, 以拉伸为 8  $\mu\text{m}$  时的散斑照相为参考散斑, 以拉伸为 9.25  $\mu\text{m}$  时的散斑照相为当前散斑, 二者相减得到的变形条纹将主要集中在距右端约 1/5 处. 均匀变形块和“奇异带”的位置看上去好象在变化, 这和实验<sup>[1]</sup> 观察到的条纹变化是一致的.

### 2.2 在不同晶粒中详细的应力和应变发展

图 6a, b, c, d 以不同的坐标尺度显示了纵向同一排晶列中的 5 个晶粒中心 (如图 4a 中 G1—G5 所示) 的拉伸应变  $\epsilon_x$  与宏观拉伸应变  $\epsilon_m$  的关系. 从图 6a 可以看出, 开始晶粒中心的拉伸应变发展是基本相同的, 只是由于取向的差异, 弹性段的斜率稍有差异. 但当局部出现塑性变形后, 晶粒中心的拉伸应变的发展出现显著的差异. 对于屈服应力较高的晶粒, 其应变水平较低; 而对屈服应力较低的晶粒, 当载荷达到屈服极限时应变有显著增长. 同时, 为了同周围晶粒的变形协调, 低屈服应力晶粒之间的应变发展也在不断竞争, 且并非是初始应变发展最快的晶粒始终发展最快. 图 6b, c 显示晶粒在进一步变形时应变发展的相互竞争. 图 6d 显示出在变形加大后晶粒的应变水平差异加大. 从图可以看出, 当试件开始颈缩失稳后, 颈缩区域中晶粒的应变显著发展, 其它区域的晶粒应变不再发展, 甚至稍有下降 (出现卸载). 而且, 随着变形的进一步发展, 局部化区域变小, 颈缩区边缘晶粒应变也不再发展.

图 7 显示了横向同一排晶列中的 4 个晶粒中心 (如图 4a 中 G6—G9 所示) 的拉伸应力  $\sigma'_x$  与宏观拉伸应变  $\epsilon'_m$  的关系. 当局部出现塑性变形后, 晶粒中心的应力发展出现了明显差异, 这些差异可能是由屈服应力的不同引起的.

### 2.3 屈服强度分布和样本差异对宏观力学行为的影响

为了研究屈服强度分布和样本差异对宏观力学行为的影响, 本工作对不同屈服应力分布分别计算了 50 个晶粒分布的样本. 表 1 显示了在晶粒屈服强度分布方差  $s$  不同时, 50 个样本计算得到的最大拉伸应力和相应的工程拉伸应变的平均值  $\bar{\sigma}_{\max}$  和  $\bar{\epsilon}_{\max}$  及其标准误差  $\Delta\sigma_{\text{std}}$  和  $\Delta\epsilon_{\text{std}}$ . 从表可以看出,  $\bar{\epsilon}_{\max}$  和  $\bar{\sigma}_{\max}$  以及承载能力随晶粒屈服应力分散性的增加而降低, 即变形局部化随材料非均匀性增大而提前. 同时, 样本差异的影响随晶粒屈服应力分散性的增加而变得更明显, 但影响不是很大.

## 3 讨论

考虑到多晶体的晶粒取向和晶粒屈服应力的差异, 随机有限元模拟得到了与散斑实验观察<sup>[1]</sup> 类似的结果, 即试件的变形在失稳前具有宏观均匀性和细观非均匀性, 而失稳后在宏观上也是不均匀的. 数值模拟揭示, 晶粒的变形经历了不断协调、不断竞争的过程, 相对来说晶粒受力则要均匀得多. 样本差异对试件的宏观性能没有太大的影响. 随着晶粒屈服应力分散性的增大, 试样失稳时的拉伸

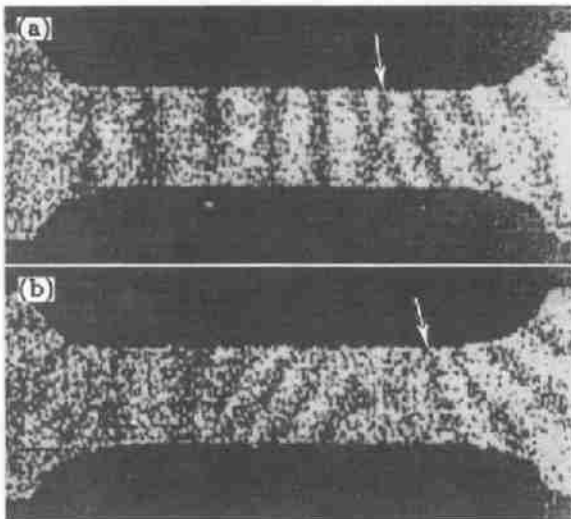


图 5 散斑实验<sup>[1]</sup> 中观察到的  $x$  分量变形条纹中的奇异现象  
Fig.5 Anomalous fringe patterns of the longitudinal deformation-component observed in the speckle experiment<sup>[1]</sup>  
(a)  $\epsilon = 1.31 \times 10^{-4}$  (b)  $\epsilon = 3.13 \times 10^{-4}$

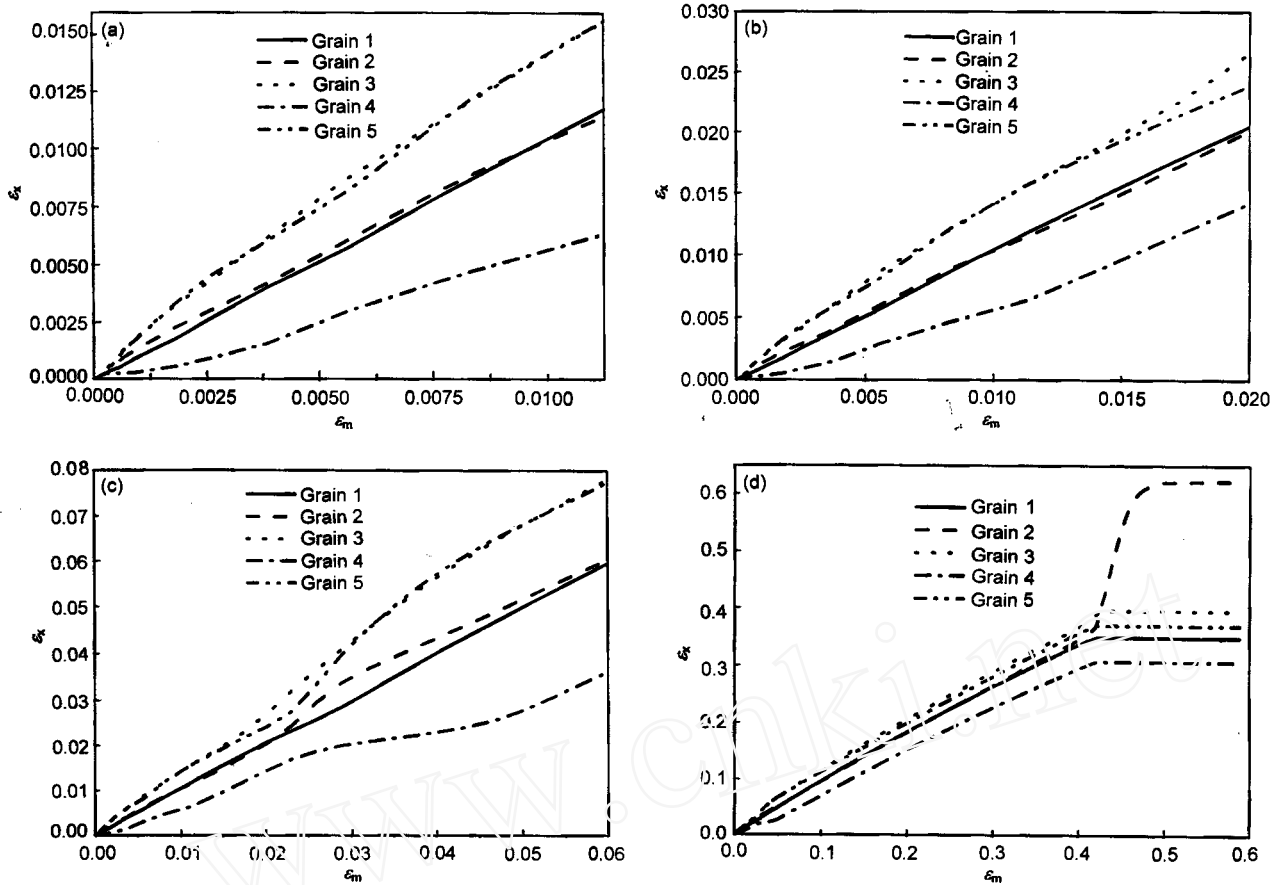


图 6 沿图 4a 中 A—A' 线不同晶粒中心的拉伸应变  $\epsilon_x$  与试件宏观拉伸应变  $\epsilon_m$  的关系

Fig.6 Relationship between the longitudinal strain,  $\epsilon_x$ , and the macroscopic longitudinal strain,  $\epsilon_m$ , at individual grain centers along line A—A' in Fig.4a

(a)  $\epsilon_m=0-0.0113$  (b)  $\epsilon_m=0-0.020$  (c)  $\epsilon_m=0-0.060$  (d)  $\epsilon_m=0-0.600$

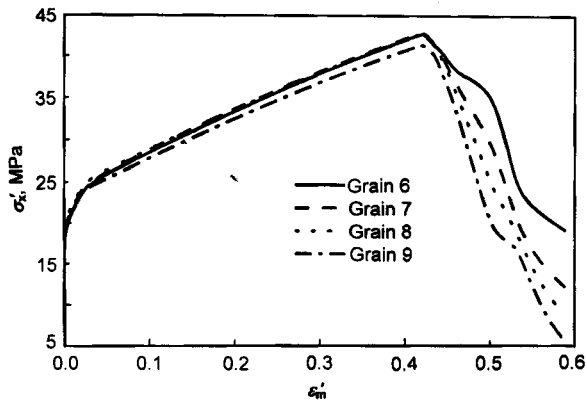


图 7 沿图 4a 中 B—B' 线不同晶粒中心的纵向拉伸应力  $\sigma_x$  与试件宏观拉伸应变  $\epsilon_m$  的关系

Fig.7 Relationship between the longitudinal stress,  $\sigma_x$ , and the macroscopic longitudinal strain,  $\epsilon_m$ , at a few individual grain centers along line B—B' in Fig.4a

应变减小。可见，材料的细观非均匀性是变形局部化的主要原因。

虽然模型考虑了不同晶粒中位错分布的不均匀性，也

表 1 最大拉伸应力和相应的工程拉伸应变的平均值 ( $\bar{\sigma}_{max}$  和  $\bar{\epsilon}_{max}$ ) 及其标准误差 ( $\Delta\sigma_{std}$  和  $\Delta\epsilon_{std}$ )

Table 1 Mean values ( $\bar{\sigma}_{max}$ ,  $\bar{\epsilon}_{max}$ ) and the standard deviations ( $\Delta\sigma_{std}$ ,  $\Delta\epsilon_{std}$ ) of the maximum tensile stress and the associated tensile strain ( $s$ —root-mean-square error of the yield strength distribution of grains)

$s$ , MPa	$\bar{\sigma}_{max}$ , MPa	$\Delta\sigma_{std}$ , MPa	$\bar{\epsilon}_{max}$	$\Delta\epsilon_{std}$
0.0	30.6606	0.0033	0.5075	0.0001
0.1	30.6576	0.0034	0.4999	0.0002
0.5	30.4822	0.0037	0.4719	0.0007
1.0	30.3198	0.0078	0.4403	0.0012
2.0	29.7604	0.0153	0.3867	0.0020
3.0	29.2268	0.0249	0.3408	0.0025
4.0	28.6724	0.0322	0.3006	0.0030
5.0	28.0890	0.0411	0.2659	0.0033
6.0	27.4874	0.0504	0.2366	0.0036
7.0	26.8700	0.0599	0.2126	0.0037

在本构关系中间接考虑了晶界的影响, 然而实际材料的细观结构远较模型复杂, 而且晶粒的几何形状多样、取向杂乱, 位错分布也不像模型中设定的那么简单. 事实上, 晶粒内部位错的分布也不均匀, 且随着变形的发展位错缠结成更为复杂的位错墙和位错胞结构, 而晶界的结构更为复杂. 因此, 为了更深入地模拟多晶体的行为, 数值模型中需要更好地直接 (或间接) 考虑晶粒和晶界的细观结构.

随机有限元法也可以进一步用于韧性材料变形后期材料损伤演化的数值模拟, 有关的研究工作正在进行中.

#### 参考文献

- [1] Gong X L. *PhD Dissertation*, University of Science and Technology of China, Hefei, 1995  
(龚兴龙. 中国科技大学博士学位论文, 合肥, 1995)
- [2] Yoshida S, Muhamed I, Pardede M, Widiastuti R, Siahaan B, Kusnowo A. *Theor Appl Fract Mech*, 1997; 27: 85
- [3] Kuhlmann-Wildsdorf D. *Philos Mag*, 1999; 79A: 955
- [4] Boas W, Hargreaves M E. *Proc R Soc London*, 1948; 196A: 89
- [5] Huntington H B. *Solid State Phys*, 1958; 7: 213
- [6] Diehl J, Mader S, Seeger A. *Z Metallkd*, 1955; 46: 650
- [7] Friedel J. *Philos Mag*, 1955; 46: 1169
- [8] Diehl J. *Z Metallkd*, 1956; 47: 331
- [9] Seeger A. *Dislocations and Mechanical Properties of Crystals*. New York: Wiley, 1957: 232
- [10] Boas W, Schmid E. *Z Phys*, 1929; 57: 575
- [11] Ashby M F. *Philos Mag*, 1970; 21: 399
- [12] Essmann U, Rapp M, Wilkins M. *Acta Metall*, 1968; 16: 1275
- [13] Clausen B, Lorentzen T, Leffers T. *Acta Mater*, 1998; 46: 3087
- [14] Hall E O. *Proc R Soc London*, 1951; 64B: 474
- [15] Petch N J. *J Iron Steel Inst*, 1953; 174: 25
- [16] Meyers M A, Chawla K K, Translated by Cheng L, Yang W. *Mechanical Metallurgy*. Beijing: Higher Education Press, 1993: 377  
(Meyers M A, Chawla K K 著, 程莉, 杨卫译. 金属力学. 北京: 高等教育出版社, 1993: 377)

www.cnki.net