

90年代的技术：先进材料和预计性设计

M. F. Ashby

英国 Cambridge 大学工程学系

提要 在当代设计中，对材料的要求日益严格。为了满足这些要求，发展了种种材料和设计方法。但要扩展目前的设计方法看来越来越困难。目前的方法主要是以连续介质模型的建立和经验方法为基础，来对付出现在许多工程应用中的大量变量。据认为，建立原子模型（靠此模型很少能得到工程解）可以对本构方程的形式，变量的组配和材料性能参数的大小进行更加深入的洞察。恰当地说，这方面信息可以指出一条有助于解决迫切工程问题的道路，即“结合模型信息”的经验方法。

1 材料的发展

我们这个专题讨论会试图对90年代的材料作一概况，即展望材料的发展趋势。历史学家告诉我们，要展望，先回顾一下常是有益处的。展望需要长远的眼光。

公元前2000年以前，切割工具大多由燧石制成。燧石是一种陶瓷。在石头、陶器、木材几乎是仅有的工程材料的时代里，燧石曾经是很重要的材料。当时还不知道金属。燧石有一种特殊作用，即可以把它制成刃口的形状，用作武器或刀子。燧石是石器时代（我们现在称之为陶瓷时代，图1）的一种工程材料。那时是几乎没有金属地位的时代。工程（房屋、船舶、兵器、用具）方面占统治地位的材料是聚合物（木材、麦秆、皮革），复合材料（如麦

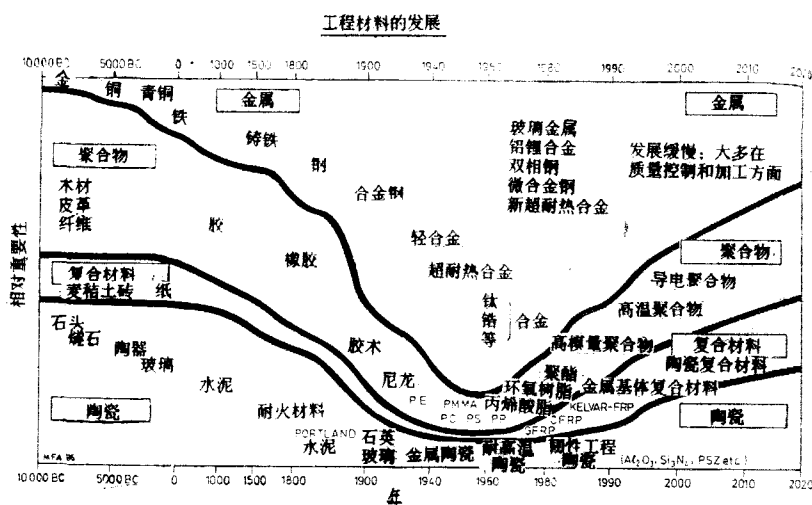


图1 力学和土木工程中材料的发展。四类材料（金属，聚合物，复合材料和陶瓷）作为时间的函数的相对重要性。此图表当然是示意性的，既不表示吨数也不表示价格。时间尺度是非线性的。

粘土砖)和陶瓷材料(石头、陶器和后来的玻璃)。

据推测,某一国家或社区的生活水平,曾经一度用每人的燧石消耗量来衡量。然而,发现了熔炼金属的方法后,金属开始取代陶瓷。公元前1500年左右,或许是以青铜的消耗量来显示谁是世界强国,再往后是铁。公元1850年以来是钢,即经济学家把一个国家的发展水平和每人生产多少钢联系起来。从这以后,金属支配了工程设计。合金钢,轻合金(在飞机设计中取代了木材)和超耐热合金的发展又加强了金属的地位。到1960年,“材料”和“冶金”成了同义词;世界各大学开了冶金学和金属科学方面的课并授予学位;大学毕业生们很少听说聚合物,陶瓷和复合材料。

但是,过去20年里发生了变化。钢铁工业在世界范围内下降。其他金属和合金的发展速度趋于减慢。其他种类材料(高强度聚合物,陶瓷,建筑用复合材料)的生产正在或随时准备着扩大(图1)。例如,基于碳纤维的复合材料生产,每年约增长30%,这种增长速度是钢在工业革命顶峰时的增长速度。现在我们正处于另一场革命的中间,即从钢铁时代到依赖于其他更先进材料时代的过渡中间。这些变化的趋势是不连续的和迅速的,由这种变化引起的破坏作用造成了很多社会和经济问题。然而,新材料给设计师提供了很多新的,令人鼓舞的机会,即孕育新产品和对旧产品作重大改进的广阔前景。

实现这一前景,要求的不仅仅是新材料;不改革设计方法就很难有什么收获。综述设计发展史不太容易,但尝试一下会很有意义。

2 有关材料的设计

早期的力学设计是经验性的。你先试一试一个方法,如果它见效,你会再用那个方法。如果它失败了,你换一个不同方法试试。这样积累起来的经验性知识,其储备量很大。它是19世纪中叶以前所有设计的基础,直至今天许多设计还在用它。这种经验性的知识是现行做法的第一个基础(图2)。

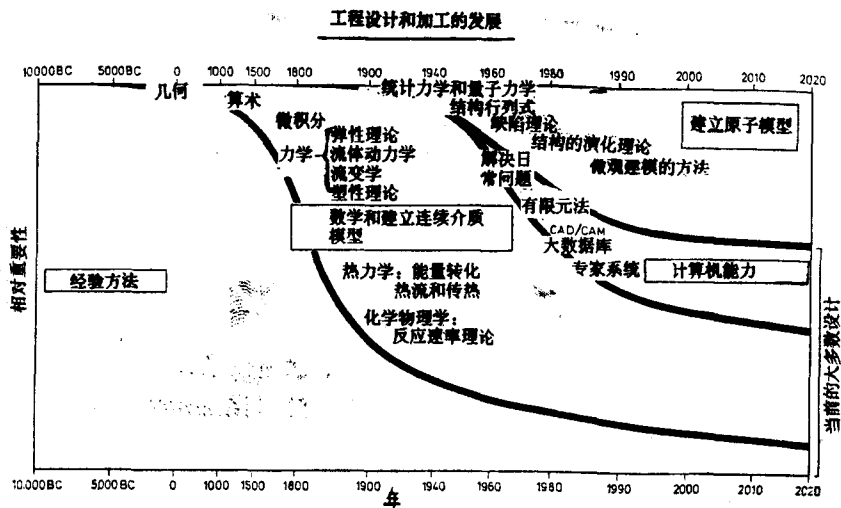


图2 力学设计和加工的发展。经验方法和建立连续介质模型的相对重要性示意,以时间的函数形式表示于图中。据论证,建立原子模型可以比现在有更巨大的作用。时间尺度是非线性的

现代力学设计使用另外两个工具箱。第一个我称之为“数学和建立连续介质模型”。材料遵循某些实验观测所得的法则,如热力学定律,率理论定律等等。从这些定律发展出弹

性、塑性、流体流动、热流、扩散和反应速率等连续介质理论。这些理论可以看成是一种“提炼了的经验方法”，它在某种程度上体现于可以用数学方法进行运算，可以简化大量实验结果。连续介质设计是非常强有力的工具。不过，认识它的局限性很重要。它提供了材料对某些激励的响应的**描述**（如室温下的拉应力），但它在**预计**材料对一个新激励的响应却无能为力（如高温下的多向应力），因为它不包含有关机理的任何信息，亦即，描述材料对一个新激励的响应，需要一组完全新的实验，从中提取出新的连续介质法则。而且，这种方法对预计材料性能参数的大小也毫无帮助。Young 氏模量作为一种材料性能参数用到 Hooke 定律中时必须测量得出，Hooke 定律本身并不能指明它的值。然而，连续介质方法仍然很重要，大多数现代力学设计是以它们为基础的。

计算机能力的最新发展大大扩大了连续介质理论的应用范围。计算机被认为是现代设计三大基础的第三个（图 2）。计算机的廉价，使得以前曾经只能用于关键部件的那些方法，现在可以用于所有部件。这样就可以用优化来使成本最低，或使性能最佳或最安全，这在以前是不可能做到的。

和这方面并行的，还有另一方面的发展，我称之为“建立原子模型”（图 2）。在过去的 100 年里，对材料原子层次和电子层次的了解已极大地增加了。辐射和粒子的衍射已能够把结构阐明清楚。量子力学已解释了键合作用的本质并预计了材料性能参数的大小如 Young 氏模量。统计力学给出了反应速率理论的基础，并建立了结构变化的模型（如钢材的热处理）。位错和晶界的缺陷理论，尤其是点缺陷理论，现在已经给出了变形、蠕变和断裂的原子状况的详细图象。然而这一切，对力学工程设计的直接影响却是微不足道的¹⁾。

关于这点是有充分根据的。原子模型包括下列**微观参数**：分子振动频率，活动位错密度，原子间相互作用势，或杂质的局部浓度（此浓度变化范围很大）。在任何实际工程材料中，这些参数根本不用知道，就能达到实用的精度。当然，这些参数可以通过用 X 射线的适当探测结构，或用磁共振，或二次离子质谱等测定法测量出来。但把这些方法应用于（比如说）活塞环的日常生产，则是不实际的。工程师需要的是只依赖于宏观**可测的那些性能**的方法：你可以检测涡轮每个叶片的硬度（要是有这个必要的话），你却不能指望测量它的活动位错密度。因此，尽管学术刊物上充满了（比如）蠕变的原子模型，设计高温设备的工程师却并不使用这些模型。

3 设计中材料的选择

考虑设计一个简单的力学构件，比如一个弹簧。弹簧是一种储能设备，几乎可用任何材料制成。比如用木材可以制成弹簧。大弓在好几代人的时间里都是由木材制成的。如果你有几代人的时间来完善它们，那你就可以对各种形状、长度和剖面都试一试，还可以用各种木料试一遍，直至最终经验地得到了很不错的设计方案。这样做需要时间，因为有许多变量，而且试验次数随着变量个数的增加而陡升：3 种木材，3 种长度，3 种厚度的弓，就需要 27 次试验。很可能凭借经验可以减少试验次数：如果一张由橡木制成的短弓不好，那么由槐木制成的短弓也不会太好。可是一张弓的设计涉及比这多得多的变量，比如剖面，以及它怎样沿着弓变化，因此如果纯粹凭借经验，那么研制过程就需要漫长的时间。

1) 电子材料的设计是例外，半导体器件是直接根据对固体中电子学的了解得来的。

建立连续介质模型就在这里对设计进行了革命。此弓对于给定的拉力和位移来说，必须能够储存尽可能多的能量；它回弹时必须释放这些能量（而不是把它们耗散成为热）。它还必须尽可能地轻，使射手携带它不觉疲劳。这些要求可以用梁理论重新计算，这是一个梁在服从一定约束下的优化刚度问题。这恰恰是连续介质力学的好处：不用精心准备试验计划，就可以在很短时间内计算出最佳的长度和厚度，以及最佳的材料选择。如果计算能力允许，用同样的方法也可以计算出弓的最优剖面。

因此连续介质设计方法是非常强有力的。当然你还得制造和试验弓，但工作量远远少得多。如果你更仔细地考察所发生的情况，那就是连续介质理论已把变量作了**组配**。第一个约束（即拉力，为人的力量）把自变量的个数减少一个；第二个约束（即牵引位移，是人的手臂长度）又减少了一个；每一个新约束（例如，质量最小）都减少另一个自变量。如果你走运，最后就只剩一个独立的无量纲数组，即设计变成完全有约束的了。即使你没有这样的好运气，也就是如果设计的某些方面你不能准确地建模（比如弓的疲劳，或弦和弓连接处的微振磨损），那你必须做的实验次数也将大大减少。经验方法总是有用的，但它的用处大多在于小调整而不在于基本设计。当然这有点过于简单化，即它低估了优秀设计师成功地解决问题所积累的大量经验知识。但重要的是，建立连续介质模型大大减少了必须做的实验次数，并更有效地指引你得到最优设计。

然而，当材料在越来越苛刻的条件下使用，而且越来越需要更高水平的优化（如安全，经济，高性能）时，连续介质方法开始不合潮流。问题在于连续介质设计的本构方程是基于实验的。Hooke定律是对实验观测的描述，即应变与应力成正比。热流方程、流体运动方程以及塑性方程也是如此。如我们已说过的，连续介质理论是提炼了的经验方法，是公式化了的以至能和数学方法协调起来，并且因此能够得到推广。

弓的拉力实验对于设计比如螺旋弹簧，并没有多大帮助。但设计一些实验来测量材料的应变做为应力的函数，再和几个简单的平衡和协调性表达式耦合起来，就可以既设计出弓，又设计出螺旋弹簧（图3，左上框）。

当条件更苛刻些，涉及更多的性能时，又会发生困难。用于高温下的弹簧可能苦于蠕变；弹簧上的载荷起伏不定，可能产生疲劳；环境也许不理想，弹簧会遭腐蚀。应力状态不是简单拉伸或弯曲，还可能非零平均应力及振荡应力。我们需要用于设计包括所有这些条件的本构方程。设计这种本构方程的实验程序变得非常棘手，这还是变量太多的缘故。更糟的是，当几种破坏机理相互作用时，叠加就很重要；而如果相互作用是非线性的，那么简单本构定律就失灵。前面提到，连

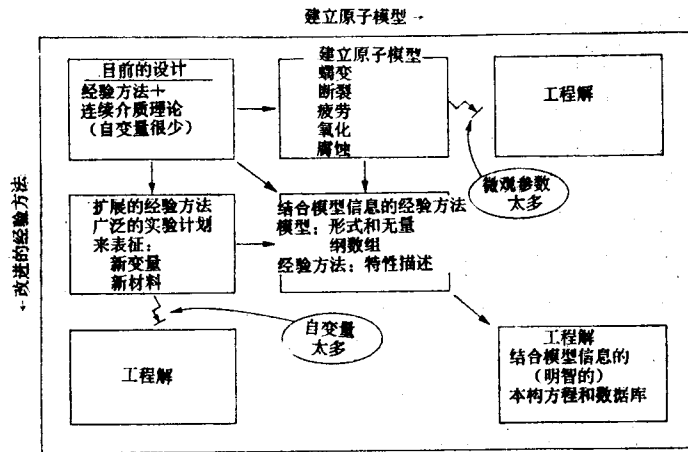


图3 对于有关材料的一个复杂设计问题的三种通向工程解的途径。从左上方开始，有改进的经验方法，建立原子模型，以及二者耦合的结合模型信息的经验方法。后者看来最有希望

续介质方法对材料性能参数的大小并没说出些什么，因此无助于挑选新材料或设计新材料。

建立原子模型在这方面会有帮助（图3顶上面一行）。它可以查出引起蠕变、疲劳、腐蚀的原子过程；它可以利用根据键合、缺陷和反应速率等理论得到的认识来建立上述原子过程的模型。问题在于这些模型尽管物理上是有根据的，但还很不精确，对工程师没有多大用处。用这种建模方法，如果你计算的蠕变率在观测的蠕变率的10倍以内，那就很不错了。基于纯原子建模的方法是失败的，因为它需要某些微观变量的准确知识，如晶界扩散速率，跃迁频率或活动位错密度，而这些是不容易测出的。

但原子模型还给了我们另外一些东西。这些模型有某些广泛的特征，恰当地解释这些特征，它们就能指明本构方程必须遵从的那些法则，即可以说是支配法则的那些法则，计算机科学家称之为“元法则（metarules）”。有些法则已经知道并已使用了很长时间。蠕变和氧化作用都是热激活过程，因此基于统计力学的模型使我们预料有一依赖于温度的率关系为

$$\text{率} \propto \exp(-Q/RT) \quad (1)$$

至少在这段温度范围内一种机理起支配作用。这种元法则有助于用新的方法组配变量，减少自变量个数（一会儿举例）。固体的原子理论给出另一种不同信息。例如它提出，激活能 Q 应该用熔点 T_m （晶态固体）或玻璃温度 T_g （非晶态固体）作为标度来进行计算，从而

$$\left. \begin{aligned} Q/RT_m &= \text{const (晶体)} \\ Q/RT_g &= \text{const (玻璃)} \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

这使得一种材料的蠕变率可以从另一种材料的推知出来。关于压力效应、合金化、沉淀或辐射，也可列出类似的表达式。问题在于，尽管原子模型本身不能得出精确的本构定律，但确实提示了本构定律所应该采取的形式，而且确定了定律中物理常数（如 Q ）值的界限（通常此界限相当窄）。

利用这种方法就是沿着“结合模型信息的经验方法”的道路，见图3对角线的说明。原子模型提示了本构方程的形式，以及本构方程中重要的变量组配形式；然后可用经验方法来建立这些数组之间的精确的函数关系，结果得到一个本构方程，它包含了建立原子模型的预测能力，带有通常曲线拟合法的精确度。同时，可以利用支配材料性能的主要法则来建立和检验方程中材料性能的数据库。你可能觉得所有这些是如此明显，几乎用不着提，但是，它对力学工程的潜在作用刚刚被承认和尊重，并冠以“明智”的设计和处理的称号（Wolf 1986）。下面用两个实例予以说明。

4 实例：防蠕变设计

首先考虑防蠕变设计。蠕变是随时间积累的缓慢变形。这个问题存在于高温能量转换装置、涡轮、核反应堆等等之中。它不如其他变形机理那样为人熟悉，因为大多数金属在室温下不发生蠕变。只有当温度高于熔点的1/3以上时，蠕变才成为严重问题。因此钢在300℃以下不发生蠕变。计算这种变形的程度很困难，因为它很敏感地依赖于应力和温度，而应该记住，这二者都不是常数，在任何真正的涡轮或反应堆里它们是随时间变化的。蠕变设计的目标是计算蠕变应变及其后果，如断裂。随着越来越强调效率和安全，花在精确蠕变计算上的费用是很高的。

目前防蠕变设计的方法是经验性的（图4左上框）。应变-时间曲线近似于一条直线，斜率决定于应力 σ 和温度 T 两个自变量。只用这两个变量，就可以相当完全地表征出切合实

际的式子。在变量的有限范围里，结果常写为

$$\epsilon = A\sigma^n [\exp(-Q/RT)]^t \quad (3)$$

其中 ϵ 是时刻 t 达到的蠕变应变， n 是常数指数， A 和 Q 是常数。这个方程用来计算蠕变应变，并作为外推、寿命预测之类设计计算的基础。但这个方程不包括第一阶段蠕变和第三阶段蠕变，也不包括随时间变化的应力和温度，或应变状态对蠕变断裂的影响。如果试图包括它们，我们就会发现自己要处理 8 个或 8 个以上的自变量，即温度，应力，频率 (ν_T, ν_σ) 和振幅 ($\Delta T, \Delta\sigma$) 或二者都有，应力不变量比率 λ ，等等：

$$\epsilon = f(\sigma, \lambda, T, t, \Delta\sigma, \Delta T, \nu_\sigma, \nu_T, \dots) \quad (4)$$

有可能安排一个实验计划来表征以上每一个变量对蠕变的影响，这是已经进行的研究方向 (图 4 向下)。然而实验计划的范围是很大的，有时发现可能会涉及不只一个蠕变机理和断裂机理，例如发现一段温度范围的特性表达式并不能安全地外推到另一段温度范围，而是需要一个新的特性描述。在各种不同载荷下扩展的经验方法失灵了。

建立原子模型是沿着另一条途径进行 (图 4 顶上一行)。它试图阐明引起蠕变的根本原子过程，即粘性流动，扩散，时间相关位错运动，晶界滑

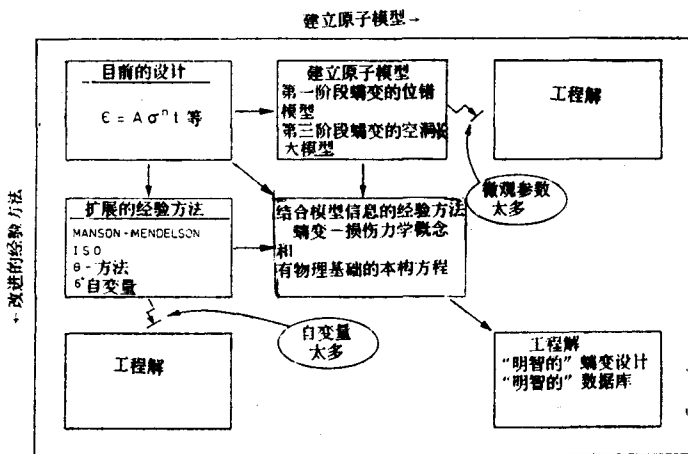


图 4 防蠕变设计。扩展目前的经验方法(左列)很困难，因为自变量太多。发展原子模型(顶上一行)导致方程中微观参数太多。将这两种思路相结合，得出了“损伤力学”的概念(对角线)，给了防蠕变设计以新的活力

移，空洞长大等等，并试图对蠕变的每一阶段根据第一原理建立模型。它取得了一些成功，即现在已经较好地了解了发生蠕变和蠕变断裂的机理，尽管用工程的话来说尚未很好地表征出来。问题产生于，如我已经说过的，原子模型包含一些微观参数，如阻止位错运动的障碍物密度，空洞核密度，等等。这些参数只通过微观测量来确定，而从工程角度来看这是不实际的。

然而，原子模型指出了另外一些有极大价值的东西。它们提示了本构方程应该采取的形式。所有第一阶段蠕变和稳态阶段蠕变的模型有一些共同点，即它们得出的不是关于应变的方程，而是关于应变率的方程；而且它们包括一个内部状态变量，即表示材料目前力学状态特性的参量。第三阶段蠕变模型和断裂模型有相同的特征：它们都得出一些关于率的方程，都包括一个内部状态变量（通常是裂纹或空洞的面积百分数），此变量在蠕变过程中发生演变 (Ashby & Dyson 1985; Ion et al 1986)。我们称这些内变量为“损伤”，因为它们描述了由于蠕变引起的材料状态的变化。原子模型指出了和一个以前形式迥然不同的本构方程。我们并不试图把应变 ϵ 表示成一些自变量的函数，而是寻求让数据满足一个耦合微分方程，即一个是应变率 $\dot{\epsilon}$ 的方程，另两个是损伤演变 \dot{D}_1 和 \dot{D}_2 的方程：

$$\dot{\epsilon} = g(\sigma, T, \lambda, D_1, D_2), \quad \dot{D}_1 = h_1(\sigma, T, \lambda, D_1, D_2), \quad \dot{D}_2 = h_2(\sigma, T, \lambda, D_1, D_2) \quad (5)$$

其中 D_1 描述第一阶段蠕变损伤， D_2 描述导致断裂的第三阶段损伤， \dot{D}_1 和 \dot{D}_2 是它们随时

间的变化率； g, h_1, h_2 是一些简单函数。乍一看来，这似乎把问题复杂化了，然而，这里只有 3 个自变量 (σ, T 和应力状态 λ)，而以前却有 8 个。况且，各个方程都比以前简单一些，（更重要的是）它们在物理上的灵活性方面具有一种能对付任意变化的应力和温度的能力。加上适当的计算机力量，这些方程经积分后，就可以求出应变和损伤的演化过程，而最终可以预测一个构件的断裂。现在可以采用方程 (5) 作为蠕变的本构方程，可以用经验的方法确定函数 g, h_1 和 h_2 。这种“结合模型信息的经验方法”（图 4 的对角线）导致了一个新的力学分支（一般称为**损伤力学**）的发展，它的应用前景远远超出了蠕变这一小小的领域。

5 实例：控制焊接的热影响域

考虑第二个例子，是加工和生产领域里的例子。大多数材料的加工是基于经验的。即使像焊接这样一个比较复杂和关键的作业，也是主要依靠直接实验方法进行的。这些实验的结果综合成图表，根据这些图表对一个给定的工作选择适当的焊接条件。当然这种方法已有大量的冶金学知识和经验做为依据，但建立原子模型的作用可以忽略。

焊接所关心的是热影响区（包括焊缝两侧的区域）的状况。在这个区域里，母板的结构已被从焊接传导来的热改变了。这种热循环并不足以使这个区域熔化，但却足以使沉淀物变粗或分解（造成铝合金中的弱点）并使晶粒生长（在钢材中，有变成马氏体、形成裂纹的危险）。焊接破坏往往是从热影响区开始的。

目前的焊接工艺中（具体体现在我刚才提到的图表中），对这一问题给出了警告，并指出将引起这种破坏的焊接条件。但这些图表所依据的数据来源于有限的实验条件范围。要想做得比这更好是很困难的，因为变量的个数很多，还因为很难把这些数据外推到其他更极端的条件，因为基本过程是复杂的和非线性的。

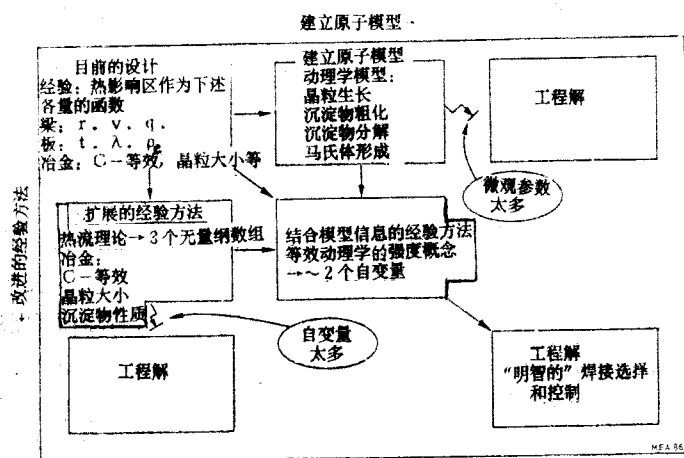


图 5 过程建模及控制。焊接的热影响区的宽度和性能，依赖于过程的变量如梁的能量 q ，半径 r ，速度 v ，依赖于被焊板的厚度 t ，板的热性能和冶金性能。这些变量的个数很多，扩展的经验方法难以对付。原子模型提出了一种办法，即把这些变量综合成为焊接循环的“等效动力学强度”，这样就大大减少了变量的个数

首先看看变量个数（图 5 左列）。当焊炬割过一块金属板时，该板上某点的温度先升高而后下降。这一循环的形式依赖于 6 个**热变量**：焊炬功率 q ，焊炬移动速率 v ，火焰或电弧直径 $2r$ ，金属板厚 t ，

金属板热导率 λ ，金属板比热 c 。这一热循环对金属板产生的影响依赖于另一组**冶金学变量**：晶粒大小，合金浓度，老化或沉淀状态，等等。甚至在最简单的合金中也至少有这方面的两个变量，而通常比这更多。

对一个有 8 个自变量的问题，其经验的特性描述简直是件吓人的事。但在这里，热流理论 (Carslaw & Jaeger 1959) 对我们会有所帮助。它告诉我们，热流的变量可以组配成 3

个无量纲数组；表面以下任意一点的温度只取决于这些数组。计算热影响区的温度时有关的自变量只有3个而不是6个。这里不涉及原子学说，而只是应用热流的连续介质理论。然而，甚至作了这样的简化，变量个数仍然很多。

冶金方面的变化就更加困难了。这里建立原子模型能够有所作为 (Ashby & Easterling 1982; Ion et al 1984) (图5顶上面一行)。晶体生长、沉淀物粗化、沉淀物分解等等模型，都已很好建立起来。然而，正如蠕变的那些情况，这些模型都含有微观参数 (动力学常数，界面扩散系数，等等)，这些参数的大小还不能精确得知。然而，所有这些模型有一个共同特点，即性能 (我们称之为 ϕ ，例如它可能是晶粒大小) 的变化率与它本身目前的值有关，与瞬时温度 $T(t)$ 有关：

$$d\phi/dt = f(\phi) \exp[-\{Q/RT(t)\}] \quad (6)$$

其中 $f(\phi)$ 是 ϕ 的某一函数 (常常是复杂函数)。于是，在焊接循环过程中，在热影响区内某一点处的这一性能的总变化，可用下式表示：

$$\int_{\phi_1}^{\phi_2} \frac{d\phi}{f(\phi)} = \int_0^{\infty} \exp\left[-\left\{\frac{Q}{RT(t)}\right\}\right] dt \quad (7)$$

一个给定的性能变化，意味着方程左边给定了一个常数，这样右边的值也就给定了。因此右边的积分确定了结构变化的范围。这可以理解为焊接循环的等效动力学强度，它量度了此焊接循环过程中发生的动力学跃变的次数 (图5中央的方框)。对于一个给定的焊接循环， $T(t)$ 是已知的，积分可以计算。结构变化的特征包含于量 Q 中，它是这一变化的特征激活能。这使得表征结构变化的变量个数减少为1，即任何具有给定的等效动力学强度值 S 的焊接过程，都产生相同的结构变化强度。这是一个巨大的简化，它对于这类 (或其他类) 加工问题的重大合理化有着潜力。

6 结 语

现代设计对材料的要求日益严格。更高性能，更大经济效益，更加可靠和安全，都要求设计师对他所用的材料有更多的了解。这方面的知识部分地包含在连续介质设计的本构方程中，包含在经验及经验性知识的形式中。扩充这方面的知识看来是很困难的，因为对于复杂的优化设计来说，所要求出的使用或过程的变量个数很多。

直至目前，加工和使用性能的原子模型，对力学设计没有太大的影响。这是因为这些模型是过分深入地扎根于基本原子过程，虽然了解了这些过程，但只能用微观测量描述其特征，这对工程师来说是不实际的。

一个可行的途径是力求确定支配材料行为的主要法则，确定支配材料性能参数的大小的法则，而它们都包含在原子模型中，并且利用它们作为“结合模型信息”的经验方法的基础。当然这里有一个先决条件，即许多“经验性”设计的深处含有从固态理论借用来的概念。然而，甚至只对两个重要领域即防蠕变设计和焊接的加工控制的匆匆一瞥，即可看出这一方法的潜在能力还没有完全发掘出来。它是前途无量的。

参 考 文 献 (6篇，略) (讨论略)

梁 焰译自: *Phil. Trans. R. Soc. London*, A322, 1567
(1987); 393—407, (董务民校)