

强韧化材料的细观力学设计

杨庆生

杨 卫

北方交通大学土木工程系, 北京 100044 清华大学工程力学系, 北京 100084

摘 要 本文主要阐述强韧化材料细观力学设计的基本概念和方法、力学模型和关键技术。探讨建立材料优化设计模型的可能途径。特别强调面向计算机的材料性能定量设计方法和材料细观力学设计的软件系统。评述当前在该领域内的若干研究进展。

关键词 强韧化, 材料设计, 细观力学, 软件系统

1 引 言

强韧化材料是指经过增强或增韧的材料, 尤指各种类型的复合材料。随着材料制造工艺的不断改进和应用领域的日益扩大, 强韧化材料的发展非常迅速。它是一种具有多相细观结构的材料, 具有可设计性, 人们可以根据材料的使用要求, 进行工艺和力学设计, 逐步从制备材料的经验设计过渡到定量的理论设计。通过各种增韧机理的实现可以获得高刚度、高强度或高韧度的先进材料。

材料的细观力学和细观设计理论几乎与复合材料本身同步发展, 并且在材料细观结构与宏观性能之间关系的这一关键问题上进行了长期的探索, 特别是近 20 年来, 取得了许多研究成果, 并逐渐形成了细观力学这一学科分支。人们力图依照细观力学的原理来设计和优化复合材料, 推动新型复合材料的研制与发展, 促进力学与材料科学的交叉与渗透, 发展新的力学原理, 并进而认识和掌握材料增韧的内在规律。在各种力学原理指导下, 开发问世了大批新型复合材料, 其中有些已经投入工程应用, 推动了各相关学科的结合, 在这种广阔的产业背景和日益完善的学科体系发展的驱动下, 复合材料的细观结构-性能关系和细观结构设计一直是国内外学术界研究的热点。

本文主要阐述强韧化材料细观力学设计的基本概念和方法、力学模型和关键技术以及优化设计的数学模型等若干问题。特别强调材料细观力学设计的定量方法与计算机辅助设计系统。

2 基本概念与方法

材料设计是一个非常广义的概念, 凡是通过某种手段来谋求改善材料性能的行为都可称之为材料设计^[1, 2]。本文所谓的细观力学设计是指按照力学原理设计细观结构参数, 使材料的宏观力学性能达到人们所期望的目标或最优化。这里特别界定了细观层次和力学性能两个概念。尽管如此, 材料的细观力学设计也是一个非常大的系统工程。因为影响材料宏观性能的因素很多, 从组分材料选择、工艺设计、界面设计及使用环境等每个环节都对材料宏观性能产生不同程度影响。我们这里主要强调材料细观结构与宏观性能的关系, 亦即将材料细观结构参数如组分材料和界面的刚度、强度、韧度等物理参数和它们的分布、体积比、形状等几何参数作为设计变量, 而将材料的宏观力学性能作为设计目标。

由于表征材料宏观力学性能的目标变量很多, 而且各个目标变量之间不一定相容, 所以很难提出一个反映材料宏观性能的综合指标。加之存在那么多的设计变量, 实际上使材料设计在数学上成为一个多变量、多目标的规划问题, 很难提出适当的模型并进行数学求解。在实际操作中必须进行简化。强韧化材料的细观力学设计的确切提法应该是以某一宏观性能(如刚度、强度、韧度)作为目标函数, 以一个或几个重要的微结构参数作为设计变量, 进行材料设计和优化。而对于某些固定的材料常数或必要的性能限制可作为约束条件引入。

材料的力学性能可分为两类: 一类是反映材料平均性能的刚度特性, 如弹性模量、泊松比、热胀系数等, 它一般控制材料的变形、振动等综合力学行为; 另一类是反映材料局部性能和破坏特征的韧(强)度特性, 它一般控制材料的破坏模式和过程。在进行细观力学分析和设计时, 后者要比前者复杂得多。强韧化材料的细观力学设计得以开展赖于近年来细观力学的迅速发展^[3-8], 细观力学正在从解释材料力学行为逐渐发展为主动设计材料性能^[4]。细观力学在建立材料细观结构与宏观性能关系方面提出了一些材料性能预测模型^[5, 8], 尽管有些模型只能得到离散的数值结果, 但这些模型构成了材料设计的基础。

材料的性能设计主要是为新型高性能材料的研制和使用服务的。由于高性能材料及其技术属于高技术领域, 材料配方、原理与工艺设计以及关键性能参数等都属于严格的保密范围, 很少能在学术期刊和学术会议上公开报道, 材料的细观力学设计也很难见到其细节和关键思想。在这种技术互相保密, 竞争日益激烈的局面下, 新材料的研制和应用都面临着更新研究手段, 加快研制速度, 降低研制成本的问题。采用计算机辅助设计将会有效地帮助解决这一问题。目前, 材料细观力学计算机辅助设计的研究趋势已经显现出来^[2]。

材料设计一般从经验的和定性的初步设计开始, 经过大量的实验分析、数值模拟等研究工作, 逐步将其设计参数量化或半量化, 由此再上升到材料的优化设计。

3 刚度设计和韧度设计

刚度和韧度从不同的侧面反映了材料的最重要的力学性能, 都具有可设计性。表1给出了刚度设计和韧度设计的简单比较。以各种复合材料为典型的材料刚度设计已经从工艺、力学理论和数值模拟等角度进行了广泛的研究, 并提出了一些细观力学模型, 例如以自洽模型

为基础的自洽模型、Mori-Tanaka 模型、自洽有限元法，以单胞模型为基础的各种解析和数值方法，以能量极值原理为基础的定界法，各种近似法等等^[5, 8]。这些模型可以根据材料细观结构参数预测材料的宏观刚度。其中细观结构参数中包含了组分材料性能、体积含量和夹杂形状等重要参数。有些模型还能反映界面性能和缺陷对材料刚度的影响。这些定量分析的结果被典型的实验数据所证实，并被应用于材料的初步设计和工艺控制之中^[24]。可以说复合材料的刚度设计在理论上已经获得基本解决。以后所要进行的工作就是解决这些理论方法在实际应用中遇到的问题，以及将这些方法进一步扩展使其适应某些特殊的问题。显然，建立与健全复合材料细观力学设计的软件系统，对于将细观力学的理论加快应用于材料的研究与使用中，进一步加强力学理论与材料科学的相互联系和渗透具有非常重要的意义。

表 1 刚度设计与韧度设计比较

	设计变量	设计目标	基础知识	力学模型	基本方法	典型工作
刚度设计	微结构和界面参数	E, μ, α	变形历史 (组分材料的变形)	代表体元	均匀化 (体积平均法)	自洽模型, 独立胞元, 近似法
韧度设计	微结构和界面参数	$\Gamma(K_c), \sigma_b$	破坏过程 (组分与界面协调性)	损伤局部单元	损伤断裂力学	

强韧化材料的韧度设计目前尚处于探索阶段。材料韧度与材料的破坏过程和破坏模式紧密相关。每一种破坏模式对应不同的增韧机理，因而具有不同的宏观破坏性能。这种破坏模式的多样性和破坏过程的复杂性，使得这个问题的研究难度极大。进行材料韧度设计必须具备关于多模式破坏过程和破坏路径选择的基本知识，而研究材料的破坏过程与路径选择的关键问题是建立各种破坏模式之间的转变准则^[9]。一般通过改变材料的微结构特别是界面的力学性能和几何参数来控制材料的破坏过程与模式。例如在复合材料中，通过改变组分材料的性能比和设置不同性质的界面或界面层来改变裂纹扩展路径^[10]。从研究手段上来讲，必须建立一套以大规模有限元法为基础的数值模拟技术，用以跟踪和模拟多相介质的多模式损伤发展和破坏过程。目前的研究工作多数集中于基体和界面裂纹、纤维拔出等独立的破坏现象^[15, 16, 17]。

强韧化材料细观力学设计的研究现状和存在的问题可以概括为：

- (1) 强韧化材料的宏观性能定量预测还只限于刚度性能。破坏性能的定量预测（亦即细观结构参数与破坏性能的定量关系）还没有实现。相应的力学模型还没有完全建立。
- (2) 强韧化材料的破坏分析仅限于单一破坏模式和固定几何构型，还没有认真研究多种破坏模式的相互转换和联合效应。多模式破坏过程的数值模拟（特别是数值模拟方法）还没有建立。
- (3) 对材料增强增韧力学原理的认识还限于定性阶段，定量的认识还很肤浅。

4 多模式破坏过程的数值模拟

进行材料韧度设计的基础是多模式破坏过程的数值模拟和裂纹扩展路径的跟踪。实验和

理论分析都已证实^[9, 12], 在均匀材料中, 裂纹是沿着 $K_{II} = 0$ 的方向扩展 而在多相材料中, 组分材料的性能比和界面性能的协调性控制了材料的破坏过程和裂纹扩展路径 在以裂纹扩展为主要特征的材料破坏中, 界面韧度是改变材料破坏模式和裂纹扩展路径的关键参数

双材料弹性力学问题由下述两个 Dundurs 参数控制:

$$\alpha = \frac{\mu_1(k_2 + 1) - \mu_2(k_1 + 1)}{\mu_1(k_2 + 1) + \mu_2(k_1 + 1)}, \quad \beta = \frac{\mu_1(k_2 - 1) - \mu_2(k_1 - 1)}{\mu_1(k_2 + 1) + \mu_2(k_1 + 1)}$$

其中 μ 是剪切模量, 对于平面应变, $k = 3 - 4\nu$; 对于平面应力, $k = (3 - \nu)/(1 + \nu)$. ν 是泊松比 下标 1, 2 分别表示材料 1 和材料 2

界面的韧度由断裂能 Γ_i 和相角 ψ 两个参数来表示^[10], 其中断裂能 Γ_i 对应裂纹能量释放率的临界值, 可以认为是依赖于加载模式的有效表面能 相角 ψ 表示外载的混合度, 亦即 I 型与 II 型断裂的相对值, ψ 可表示为

$$\psi = \tan^{-1}[(\sigma_{12}/\sigma_{22})_{r=l}]$$

其中 l 是在 K 主导区内选择的参考长度, 当表示界面弹性失配的 Dundurs 参数 $\beta = 0$ 时, 上述定义可简化为:

$$\psi = \tan^{-1}(K_{II}/K_I)$$

界面韧度 $\Gamma_i(\psi)$ 可唯象地表示为下列公式之一^[9]:

$$\Gamma_i(\psi) = G_1^c [1 + (\lambda - 1) \sin^2 \psi]^{-1}$$

$$\Gamma_i(\psi) = G_1^c [1 + \tan^2((1 - \lambda)\psi)]$$

$$\Gamma_i(\psi) = G_1^c [1 + (1 - \lambda) \tan^2 \psi]$$

其中 G_1^c 是界面纯 I 型断裂的韧度 λ 是材料参数, 反映界面对加载模式的敏感程度 对 plexiglass-epoxy 界面, $\lambda = 0.3$ ^[11].

对于含有一种界面的二元系统, 界面裂纹扩展路径取决于下列参数: 加载相角 ψ , 界面韧度 $\Gamma_i = \Gamma_i(\psi)$, 均匀材料 1 和 2 的 I 型韧度 Γ_1 和 Γ_2 .

- 1) 当 $\Gamma_i \ll \Gamma_1, \Gamma_2$ 时, 对于任意 ψ , 裂纹沿界面扩展
- 2) 当 $\Gamma_i \approx \Gamma_2, \Gamma_2 \ll \Gamma_1$ 时, 存在一个相角范围:

$$0 \leq \psi \leq \psi_{max}, \quad \text{裂纹保持在界面上;}$$

$$\psi > \psi_{max}, \quad \text{裂纹折入材料 2}$$

其中 ψ_{max} 与 α, β 和 Γ_1/Γ_2 有关 这一准则也被表示为^[12, 13]:

$$G_i/G_2^{max} > \Gamma_1/\Gamma_2, \quad \text{裂纹保持在界面上;}$$

$$G_i/G_2^{max} < \Gamma_1/\Gamma_2, \quad \text{裂纹折入材料 2}$$

其中 G_2^{\max} 是 G_2 相对于裂纹折角 Ω 的最大值

3) 当一个裂纹从材料 1 垂直于界面扩展时, 有

$$\Gamma_i / \Gamma_2 \leq r, \quad \text{裂纹折入界面上;}$$

$$\Gamma_i / \Gamma_2 > r, \quad \text{裂纹穿过界面}$$

上式中 Γ_i 为 $\psi = 45^\circ$ 时的值, 对于零值附近的 α , $r = 0.25^{[10, 11]}$.

利用这些准则基本上可以确定裂纹在多相介质中的扩展路径^[14]. 在此基础上可以建立以裂纹扩展为主要特征的多相材料破坏过程数值模拟的有限元方法^[25]. 在这里全部利用断裂能和相角等表示材料性能的参量, 与那些利用应力参量模拟破坏过程的方法^[18, 19]相比, 更有利于进行材料的韧度设计.

5 优化设计初探

任何设计本身都包含了优化的意思, 但严格意义的优化必须找出最优解或近似最优解. 材料的细观力学设计的优化目前仍然难于展开, 其关键在于材料设计的定量研究尚不深入. 另外, 传统的结构优化理论不含有局部破坏条件^[20], 这也使强韧化材料的韧度优化比刚度优化更困难.

材料设计的优化模型可通过两种途径来建立, 第一种方法是直接以材料性能为目标函数, 以一个或几个重要的微结构参数作为设计变量, 以材料变形或破坏的协调性条件为约束条件, 建立材料性能优化设计的数学模型. 这种方法可能对材料的刚度设计较为可行, 只要利用上面提到的细观力学模型, 再加上相应的约束条件, 即可进行优化计算.

设材料宏观刚度 E 可表示为 n 个细观参数 x_1, x_2, \dots, x_n 的函数

$$E = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

则材料刚度设计的优化模型为:

$$\begin{aligned} \max \quad & E \\ \text{s.t.} \quad & g_i(x_1, \dots, x_n) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \end{aligned}$$

其中约束条件根据参数的物理意义和对材料性能的要求确定.

第二种方法是根据材料的增强增韧机理, 建立间接的优化准则. 这种方法主要针对材料局部性能优化. 复合材料的增强机理主要通过加入高模量的纤维来实现, 而增韧机理取决于材料中的固有缺陷和它周围的细观特征. 主要有两类增韧机理: 第一类发生在裂纹面上, 通过纤维桥联、粒子钉铆等方法阻止裂纹的扩展; 第二类发生在过程区内, 通过相变、塑性变形等钝化裂纹尖端. 表 2 列出了几种典型的增韧方法和相应的增韧效果^[16]. 例如连续纤维复合材料的主要增韧机理是纤维的桥联作用^[10, 15]. 实际上这预示了裂纹的扩展存在一条优化的路径, 否则这种增韧机理就不能得以实现. 由此可设计界面参数. 事实上, 根据破坏模式转换和裂纹路径选择准则, 界面韧度是裂纹扩展路径选择的控制参数, 对于不同的组分材料搭

配,合适的界面断裂能能够使裂纹扩展沿着一条优化的路径扩展,进而使材料的宏观韧度最大。上述思想可归结为基于破坏模式和增韧机理的材料韧度设计。这种方法的优点是将材料的破坏过程、增韧机理和宏观韧度紧密地联系在一起,并且将界面韧度作为一个重要的设计变量^[25]。

表 2 增韧陶瓷的韧性

增韧机理	相变	微裂纹	金属弥散	晶须粒子	纤维
最大韧性 (MPa/m ^{3/2})	~ 20	~ 10	~ 25	~ 15	> 30

一个优化设计是否合理取决于多种因素。由于材料变形和破坏是组分材料性能与界面性能相互协调的作用过程,所以在约束条件中必须谨慎建立对每个参数的限制条件,不仅从物理概念上对某些微结构参数加以必要的约束,有时还要考虑工艺上的要求以及对材料其他宏观性能的要求。

影响材料性能的因素很多,这启发我们可以从多个侧面设计材料。例如通过最小应力集中和最小残余应力设计,得到夹杂的形状优化和界面性能优化^[21, 22, 23]。这些工作仍然利用刚度或剪切强度来表示界面的性能,难以与材料的韧度相联系。

6 材料细观力学设计软件系统

建立材料设计的软件系统是实现材料设计由定性到定量的关键和标志。这个软件系统以原理模拟和数值分析为主要功能,它的主要内容和结构如图 1 所示。其中的部分功能模块已经能够运行^[25],其余部分正在进一步完善,并将吸收一些新的模型和研究成果。

组分材料数据库 分类建立组分材料的数据库,并用多级菜单系统管理数据流。基体材料分为树脂、陶瓷、金属三类,增强材料分为连续纤维、短纤维(晶须)、颗粒、混杂四大类。每一种材料含有弹性模量、泊松比、热和湿膨胀系数、屈服极限、切线模量、硬化系数等。数据库具有增加、查询、编辑、删除功能。

细观结构模型库 建立细观结构的几何模型,包括增强物的几何形状(连续纤维、短纤维、晶须、颗粒)和分布方式(单向、随机、层合)。

细观力学模型库 包括用于刚度预测的近似半经验公式、自洽模型、广义自洽模型、自洽有限元法等,用于破坏分析和韧度预测的整体-局部模型,这是系统的关键部分。也可考虑开发材料设计的建模专家系统。

数值方法与优化分析库 系统的主要部分,包含数值分析的有限元法(单元库、求解库和参数优化数值方法),这部分决定了系统的效率和精度。

软件系统主控部分采用 Turbo-C 语言编程,具有方便的人机界面与完善的图象处理功能,多级子菜单系统与宏指令使各个功能模块之间互相联系。采用开放式程序设计思想,使系统具有再开发能力。

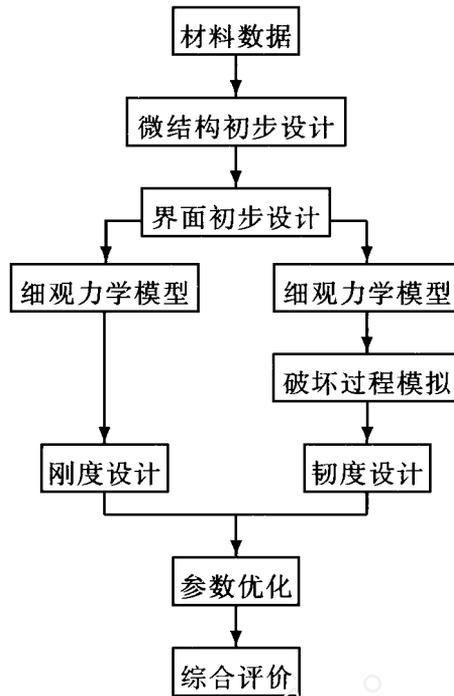


图1 材料设计软件系统框图

7 结 论

材料设计是一项复杂的系统工程,在某些重要的问题上已经取得若干进展。材料的细观力学设计是以力学原理为基础的,设计建立在充分的分析基础之上。材料刚度设计的基础是建立微结构-宏观刚度关系;材料韧度设计的基础是建立微结构-破坏过程-材料韧度之间的关系。材料韧度设计要比刚度设计困难得多。优化设计的关键在于建立相应的力学和数学模型。建立强韧化材料细观力学设计的计算机辅助系统是将理论应用于实际的桥梁,也是实现材料设计由以定性为主转为以定量为主的标志。

参 考 文 献

- 1 Ashby M F. Technology of the 1990s: Advanced materials and predictive design, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 1987, A 322: 393~ 407
- 2 Krockel H. Computerized materials- information systems, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.*, 1987, A 322: 373~ 391
- 3 杨卫, 黄克智, 余寿文. 材料强韧化的宏观断裂力学理论. *力学与实践*, 1991, 13 (6): 1~ 9
- 4 杨卫. 细观力学和细观损伤力学. *力学进展*, 1992, 22 (1): 1~ 9
- 5 Mura M T. *Micromechanics of defects in solids* (the 3rd edit), Martinus Nijhoff, The Hague, 1987
- 6 余寿文. 断裂损伤与细观力学. *力学与实践*, 1989, 10 (6): 12~ 19
- 7 孙庆平. 固体相变过程中的力学问题及其研究进展. *力学进展*, 1995, 25 (3): 303~ 317
- 8 杨庆生. 计算微观力学与复合材料的微结构设计. 大连理工大学博士论文, 1991
- 9 Hutchinson J W, Suo Z. Mixed mode cracking in layered materials. *Advances in Applied Mechanics*, 1991, 28
- 10 Evans A G, et al. The fracture energy of bimaterial interfaces. *Mater. Sci. Engng.*, 1990, A 126: 53~ 64

- 11 Evans A G The mechanical performance of fiber reinforced ceramic matrix composites *Mater. Sci. Engng.* , 1989, A 107: 227~ 239
- 12 He M Y, Hutchinson J W. Kinking of crack out of an interface *J. Appl. Mech.* , 1989, 56: 270~ 278
- 13 He M Y, Bartlett A, Evans A G. Kinking of a crack out of an interface: role of in plane stress *J. Am. Ceram. Soc.* , 1991, 74: 767~ 771
- 14 Evans A G et al On crack path selection and the interface fracture energy in bimaterial systems *Acta Metall.* , 1989, 37 (12): 3249~ 3254
- 15 Marshall D B, Cox B N, Evans A G The mechanics of matrix cracking in brittle matrix fiber composites *Acta Metall.* , 1985, 33 (11): 2013~ 2021
- 16 Evans A G Perspective on the development of high- toughness ceramics *J. Am. Ceram. Soc.* , 1990, 73: 187~ 206
- 17 Taya M et al Toughening of a particulate- reinforced ceramics matrix composite by thermal residual stress *J. Am. Ceram. Soc.* , 1990, 73: 1382~ 1391
- 18 Cao H C A model for crack extension in metal- reinforced brittle solids in Advanced Composite Material 485~ 492
- 19 Bakuckas J G et al A numerical model for predicting crack path and modes of damage in unidirectional metal matrix composites *J. Reinf. Plas Comp.* , 1993, 12 (3): 341~ 358
- 20 Eschenauer H A, Kobelev V V. Structural analysis and optimization modelling including fracture conditions *Int. J. Num. Meth. Eng.* , 1992, 34: 873~ 888
- 21 Trapeznikov D A et al Modelling approach to optimization of mechanical properties of discontinuous fiber reinforced C/C composites *Composites*, 1992, 23 (3): 174~ 182
- 22 Caman G P et al Optimization of fiber coatings to minimize stress concentrations in composite materials *J. Comp. Mate.* , 1993, 27 (6): 589~ 612
- 23 Gulrajani S N, Mukherjee S Sensitivities and optimal design of hexagonal array fiber composites with respect to interphase properties *Int. J. Solids Structures*, 1993, 30 (15): 2009~ 2026
- 24 杨庆生, 杨卫等 复合材料的宏观性能与参数设计. 力学与实践, 1996, 18 (3): 1~ 7
- 25 杨庆生 复合材料的破坏行为与细观力学设计. 清华大学博士后研究报告, 1996

MICROMECHANICAL DESIGN FOR THE TOUGHENED MATERIALS

Yang Qingsheng

Yang Wei

Dept of Civil Engineering,

Dept of Engineering Mechanics,

Northern Jiaotong University, Beijing 100044

Tsinghua University, Beijing 100084

Abstract The article reviews the basic concepts and methodology of micromechanical design for the toughened materials. A discussion of the mechanical models, design criteria and optimization design for the stiffness and toughness properties of the materials is given in detail. The computerized material performance design and CAD software systems are emphasized. Some advances are also discussed.

Keywords toughening, material design, micromechanics, CAD system.