

基于均匀化方法的钨丝增强锆基块体非晶复合材料 等效弹性常数预测

廖光开, 李乡安, 邹 萍, 陈舒敏, 龙志林

(湘潭大学 土木工程与力学学院, 湘潭 411105)

摘 要: 基于钨丝增强锆基块体非晶复合材料结构特点及均匀化方法, 建立计算该复合材料等效弹性常数的理论模型; 结合有限单元法对钨丝增强锆基块体非晶复合材料等效弹性常数进行数值计算; 分析增强相的体积分数或尺寸对钨丝增强锆基块体非晶复合材料有效性能的影响。研究结果表明: 将均匀化理论与有限元方法相结合能有效地预测具有周期性细观结构的块体非晶复合材料的有效弹性性能, 为合理设计该类材料奠定基础。

关键词: 块体非晶复合材料; 均匀化理论; 有限元分析; 增强相; 弹性常数

中图分类号: TG139

文献标志码: A

Homogenization-based approach for predicting equivalent elastic constants of tungsten fiber reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites

LIAO Guang-kai, LI Xiang-an, ZOU Ping, CHEN Shu-min, LONG Zhi-lin

(College of Civil Engineering and Mechanics, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

Abstract: Based on the structural signature of tungsten-fiber reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites (BMGMCs) and homogenization theory, a theoretical model for calculating their equivalent elastic constants was established. The equivalent elastic constants of these composites were predicted by the proposed model combined with the finite element analysis. The effects of the volume fraction and size of the reinforced phases on the effective properties of tungsten-fiber reinforced BMGMCs were further studied. The results demonstrate that a combined approach of the homogenization theory and the finite element formulation can effectively predict the elastic properties of tungsten-fiber reinforced BMGMCs with periodic meso-structure and thus, providing bases for the rational design of this kind of composite.

Key words: bulk metallic-glass matrix composite; homogenization theory; finite element analysis; reinforced phase; elastic constant

钨丝增强锆基块体非晶复合材料作为一种新型高级的复合材料, 具有高强、高弹、耐磨和耐蚀等特点^[1-3]。由于钨丝的引入使锆基块体非晶合金中局部软化的剪切带^[4-5]得到加固, 从而极大地提高了这种复合材料的塑性, 并具有良好的自锐性^[6-8]。因此, 钨丝增强锆基块体非晶复合材料在军工、航空、体育等领域得到广泛应用。近年来, 国内外学者对该种新型材料

的力学性能进行了大量实验研究(如刚度、强度、断裂、损伤等)^[1], 但现阶段对其弹性常数的预测还鲜有文献报道。建立合适的等效弹性计算模型也许有益于理性设计钨丝增强锆基块体非晶复合材料。

钨丝增强锆基块体非晶复合材料由块体非晶基体和钨纤维组合而成, 其几何细观结构呈周期性, 对其力学性能的研究可以尝试选择具有代表性的细观单元

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51071134); 湖南省自然科学基金重点项目(12JJ2024)

收稿日期: 2013-10-08; 修订日期: 2014-01-23

通信作者: 龙志林, 教授, 博士; 电话: 0731-58298287; E-mail: longzhi@xtu.edu.cn

进行分析,预测其等效弹性性能。目前,对复合材料等效弹性常数的预测方法和模型很多,如自洽理论^[9-10]、Mori-Tanaka方法^[11]、自洽模型^[12]等。这几种模型在分析之前都进行了较多的假设,其分析结果和材料的实际情况存在较大的偏差,具有一定的局限性,不能精确地描述材料的应力应变场。随着国内外学者多年来研究的深入,综合考察了纤维取向、界面和增强相的几何结构等多方面因素对弹性性能的影响,HASSANI等^[13-14]成功地运用均匀化理论模型预测或计算了具有细观周期性结构复合材料的弹性常数。同时均匀化方法是一种具有严格理论基础的数学方法。根据复合材料细观周期性的特点,通过多尺度小参数渐近展开的摄动方法,建立有关位移、应变和应力场的摄动方程,通过求解这些方程可分别得到宏观和细观两个尺度的相关力学性能参数,既能从细观尺度分析材料的等效模量和变形,又能从宏观尺度分析结构的响应^[15],所以均匀化方法被广泛应用于复合材料力学性能分析^[16-17]。

本文作者基于文献[18]中报道的钨丝增强锆基块体非晶复合材料(W/Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni₁₀Be_{22.5})的结构特点,利用均匀化方法建立计算该复合材料等效弹性常数的理论模型,并结合有限单元法建立了计算钨丝增强锆基块体非晶复合材料等效弹性常数三维有限格式和完整的宏观、细观分析步骤;用Visual C++编写均匀化理论的计算程序Homo3D,研究增强相的体积分数及其尺寸对钨丝增强锆基块体非晶复合材料有效性

能的影响。

1 均匀化过程及其有限元格式

1.1 渐近均匀化过程

如图1(a)所示,设钨丝增强锆基块体非晶合金材料在三维空间中占据区域为 Ω^ε ,其细观结构可看成是非均质单元在空间的周期性重复排列。设该物体受体积力 f 、力边界 Γ_t 上的表面力 t 以及位移边界 Γ_v 上的给定位移 $\bar{u}$ 的作用。当该物体处于静力平衡状态时,应满足弹性力学的基本方程和边界条件。由于复合材料具有非均匀结构(即钨丝增强相分散于基体中),当涉及到钨丝增强相的细微结构时,用传统方法直接求解此边值问题异常困难。

在宏观某一点处的细观结构可看成是非均质单胞在空间中周期性重复排列,因此,宏观结构的性能参数是微结构的平均值。实际的非均质材料细观结构具有高度非均匀性和周期性,当宏观结构受外部载荷作用时,使得结构场变量 ϕ^ε (如位移和应力)在宏观位置 x 的非常小的邻域 ε 内也会有很大变化,并且呈周期性,即

$$\phi^\varepsilon(x) = \phi(x, y) = \phi(x, y + NY), y = x / \varepsilon \quad (1)$$

式中: x 为宏观尺寸坐标; y 为细观尺寸的坐标; ε 为两种尺度之比; N 为一整数; Y 为周期。假设宏观的

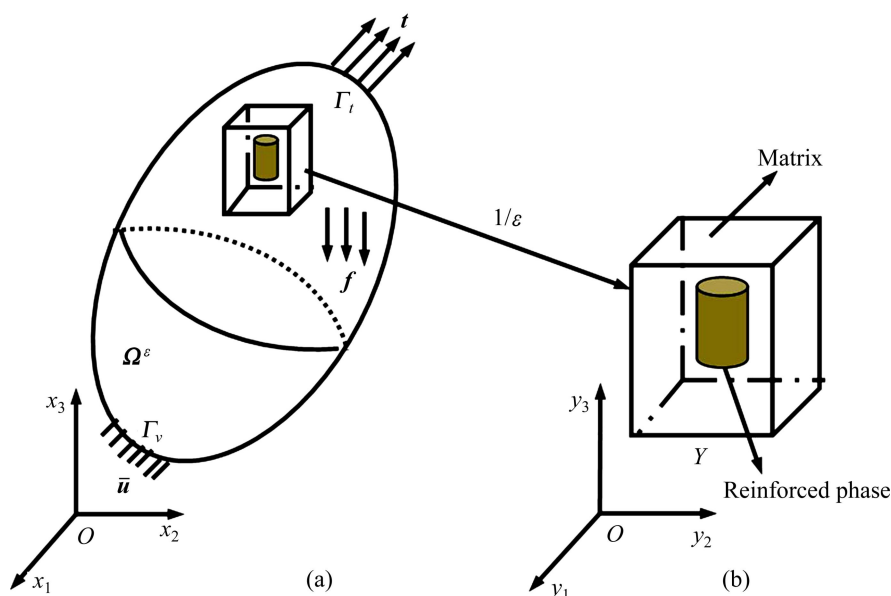


图1 具有细观周期性结构的钨丝增强锆基块体非晶复合材料结构及其单胞

Fig. 1 Illustration of structure of tungsten fiber reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites with periodic microstructures: (a) Global configuration; (b) Unit cell

波动(x 的波动)对场变量的影响较细观的(y 的波动)要小得多,通过 $y = x/\varepsilon$ 坐标变换,可以将宏观区域 Ω^ε 中的一点变换为一个具有周期性结构的单胞 Y (见图1(b))。将单胞进行等效均匀化,当 ε 趋近于零时,等效均匀化后的单胞弹性力学常数反映了原复合材料等效均质的结果,由此可求得钨丝增强铅基块体非晶合金复合材料的等效弹性力学常数。

假设单胞为线弹性介质,在 Ω^ε 中,满足下列基本方程和边界条件:

平衡方程,

$$\sigma_{ij}^\varepsilon + f_i = 0 \quad (2)$$

几何方程,

$$e_{ij}^\varepsilon = \frac{1}{2}(u_{i,j}^\varepsilon + u_{j,i}^\varepsilon) \quad (3)$$

本构方程,

$$\sigma_{ij}^\varepsilon = E_{ijkl}^\varepsilon e_{kl}^\varepsilon \quad (4)$$

力学边界条件,

$$\sigma_{ij}^\varepsilon n_i = t_i \quad (5)$$

位移边界条件,

$$u_i^\varepsilon = \bar{u}_i \quad (6)$$

式中: E_{ijkl}^ε 为材料的弹性张量; u_i^ε 为位移张量; σ_{ij}^ε 为应力张量; e_{ij}^ε 为应变张量; n_i 为力边界 Γ_i 上的单位法向量;上标 ε 表示该函数具有两尺度的特征。

将宏观尺度下的位移场 u^ε 展开成关于小参数 ε 的渐近展开式:

$$u^\varepsilon(x) = u^{(0)}(x, y) + \varepsilon u^{(1)}(x, y) + \varepsilon^2 u^{(2)}(x, y) + \dots, y = x/\varepsilon \quad (7)$$

式(7)中展开的各项表征了位移局部振荡的精细程度,随着展开项数的增加,式(7)逐渐趋近于真实位移场在微细观尺度下的振荡情况。根据线弹性范围的虚位移原理有^[19]

$$\int_{\Omega} E_{ijkl} \frac{\partial u_k^\varepsilon}{\partial x_l} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega} f_i^\varepsilon v_i d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i d\Gamma \quad (8)$$

式中: v_i 为满足位移边界条件的虚位移。由 $y = x/\varepsilon$ 及链式法得

$$\frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} = \frac{\partial v_i(x, y)}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_i(x, y)}{\partial y_j} \quad (9)$$

将式(7)和(9)代入式(8),得

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^\varepsilon} E_{ijkl} \left\{ \frac{1}{\varepsilon^2} \frac{\partial u_k^0}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \frac{1}{\varepsilon} \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_k^0}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] + \right. \\ \left. \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \left(\frac{\partial u_k^1}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^2}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \right] + \varepsilon(\dots) + \dots \right\} d\Omega = \\ \int_{\Omega^\varepsilon} f_i^\varepsilon v_i d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i d\Gamma \end{aligned} \quad (10)$$

根据 Y 周期函数的性质^[20]得

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega^\varepsilon} \psi \left(\frac{x}{\varepsilon} \right) d\Omega = \frac{1}{|Y|} \int_Y \psi(y) dY d\Omega \quad (11)$$

结合式(10)和式(11)得

$$O\left(\frac{1}{\varepsilon^2}\right): \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \frac{\partial u_k^0}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} dY d\Omega = 0 \quad (12)$$

$$\begin{aligned} O\left(\frac{1}{\varepsilon}\right): \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \cdot \right. \\ \left. \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_k^0}{\partial y_l} \frac{\partial v_i}{\partial x_j} \right] dY \right\} d\Omega = \\ \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y p_i v_i ds \right) d\Omega \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} O(\varepsilon^0): \int_{\Omega} \left\{ \frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \cdot \right. \\ \left. \left[\left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \left(\frac{\partial u_k^1}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^2}{\partial y_l} \right) \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \right] dY \right\} d\Omega = \\ \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y f_i v_i dY \right) d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i d\Gamma \end{aligned} \quad (14)$$

式(13)中: p_i 为作用在增强相边界上的力。

根据周期性边界条件,对式(12)和(13)进行相关数学变换可求得

$$u^0(x, y) = u^0(x) \quad (15)$$

$$u_i^1 = -\chi_i^{kl}(x, y) \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_l} - \psi_i(x, y) + \bar{u}_i^1(x) \quad (16)$$

式中: χ^{kl} 和 ψ 分别是式(17)和(18)的解

$$\int_Y E_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \frac{\partial v_i(y)}{\partial y_j} dY = \int_Y E_{ijkl} \frac{\partial v_i(y)}{\partial y_j} dY \quad (17)$$

$$\int_Y E_{ijpq} \frac{\partial \psi_k}{\partial y_l} \frac{\partial v_i(y)}{\partial y_j} dY = \int_Y p_i v_i(y) dY \quad (18)$$

设 $v = v(x)$,代入式(14)得

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \left[\frac{1}{|Y|} \int_Y E_{ijkl} \left(\frac{\partial u_k^0}{\partial x_l} + \frac{\partial u_k^1}{\partial y_l} \right) dY \right] \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega = \\ \int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y f_i dY \right) v_i(x) d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i(x) d\Gamma \end{aligned} \quad (19)$$

将式(16)代入式(19)得

$$\int_{\Omega} \left[\frac{1}{|Y|} \int_Y \left(\mathbf{E}_{ijkl} - \mathbf{E}_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) dY \right] \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_l} \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega =$$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{E}_{ijkl} \frac{\partial \psi_k}{\partial y_l} dY \right) \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega +$$

$$\int_{\Omega} \left(\frac{1}{|Y|} \int_Y f_i dY \right) v_i(x) d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i(x) d\Gamma \quad (20)$$

根据式(20)和虚位移原理得胞元宏观等效弹性张量:

$$\mathbf{E}_{ijkl}^H(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \left(\mathbf{E}_{ijkl} - \mathbf{E}_{ijpq} \frac{\partial \chi_p^{kl}}{\partial y_q} \right) dY \quad (21)$$

式中: χ_p^{kl} 为单胞域上的位移场; k, l, p 和 q 为相应的张量指标符号。令

$$\tau_{ij}(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{E}_{ijkl} \frac{\partial \psi_k}{\partial y_l} dY \quad (22)$$

$$b_i(x) = \frac{1}{|Y|} \int_Y f_i dY \quad (23)$$

将式(20)改写为

$$\int_{\Omega} \mathbf{E}_{ijkl}^H \frac{\partial u_k^0(x)}{\partial x_l} \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega = \int_{\Omega} \tau_{ij}(x) \frac{\partial v_i(x)}{\partial x_j} d\Omega +$$

$$\int_{\Omega} b_i(x) v_i(x) d\Omega + \int_{\Gamma_i} t_i v_i(x) d\Gamma \quad (24)$$

式中: τ_{ij} 和 b_i 分别为胞元内的平均残余应力和平均体力张量。式(24)即为均质化问题在宏观坐标系统中构建的整体虚位移方程。

通过求解 $\mathbf{E}_{ijkl}^H$ 可将细观非均质问题转化为均质问题, 借助数值算法可求得解析解, 根据式(20)和(21), 结合有限元算法, 推导适合于钨丝增强铅基块体非晶复合材料的均匀化法的三维有限元格式。

1.2 均匀化理论的三维有限元计算格式

图 2(a)所示为钨丝增强铅基块体非晶复合材料周期性结构的几何示意图。图中方框所示区域表示所选择的单胞结构。根据均匀化理论, 结构的宏观等效弹性张量 $\mathbf{E}_{ijkl}^H$, 必须通过求解式(17)单胞结构的位移 χ_i^{kl} 得到, 即利用周期性边界条件, 通过求解六次方程组可分别求得: $\chi_i^{11}, \chi_i^{22}, \chi_i^{33}, \chi_i^{12} = \chi_i^{21}, \chi_i^{23} = \chi_i^{32}, \chi_i^{13} = \chi_i^{31}$, 然后通过回代 χ_i^{kl} 到式(21)中可得 $\mathbf{E}_{ijkl}^H$ 。采用六面体 8 节点等参单元对单胞区域进行离散, 并利用相应的插值函数 $\mathbf{x}_i$ 、 $\mathbf{v}_i$ 及 χ_i^{kl} 进行插值有:

单元内任意一点的坐标变换公式,

$$\mathbf{x}_i = N_m(z_1, z_2, z_3) \bar{\mathbf{x}}_{mi} \quad (25)$$

单元内任意一点的虚位移,

$$\mathbf{v}_i = N_m(z_1, z_2, z_3) \bar{\mathbf{v}}_{mi} \quad (26)$$

单元内任意一点的位移,

$$\chi_i^{kl} = N_m(z_1, z_2, z_3) \bar{\chi}_{mi}^{kl} \quad (27)$$

其中, 节点 m 的形函数 $N_i(z_1, z_2, z_3)$ 由局部坐标

给出, $N_m(z_1, z_2, z_3) = \frac{1}{8} \prod_{i=1}^3 (1 + \bar{z}_i z_i)$, $\bar{z}_i$ 为母单元中的

节点坐标, m 为哑指标可取 1, 2, ..., 8, i 为自由指标, 可取 1, 2, 3; $\bar{\mathbf{x}}_{mi}$ 表示单元中结点 m 的第 i 坐标分量; $\bar{\mathbf{v}}_{mi}$ 表示单元中结点 m 的第 i 个虚位移分量; $\bar{\chi}_{mi}^{kl}$ 表示单元中结点 m 的第 i 个位移分量。根据偏微分法则及式(25)可知:

$$\frac{\partial N_i}{\partial z_j} = \frac{\partial N_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial z_j} = \mathbf{J}_{kj} \frac{\partial N_i}{\partial x_k} \quad (28)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial x_j} = \frac{\partial N_i}{\partial z_k} \frac{\partial z_k}{\partial x_j} = \mathbf{J}_{kj}^{-1} \left[\frac{\partial N_i}{\partial z_k} \right] \quad (29)$$

式中: $\mathbf{J}_{kj} = \frac{\partial x_k}{\partial z_j}$ 称为 Jacobian 矩阵。定义应变矩阵为

$$\mathbf{B}_{6 \times 24} = [\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \dots, \mathbf{b}_8], \text{ 单位阵 } \mathbf{I}_{6 \times 6} \text{ 及初始应变矩阵 } \boldsymbol{\varepsilon}_0^{kl} = \begin{bmatrix} \varepsilon_0^{11} & \varepsilon_0^{22} & \varepsilon_0^{33} & \varepsilon_0^{23} & \varepsilon_0^{13} & \varepsilon_0^{12} \end{bmatrix}_{6 \times 6} = \mathbf{I}_{6 \times 6}。$$

$$\mathbf{b}_i = \begin{bmatrix} \partial N_i / \partial x_1 & 0 & 0 \\ 0 & \partial N_i / \partial x_2 & 0 \\ 0 & 0 & \partial N_i / \partial x_3 \\ \partial N_i / \partial x_2 & \partial N_i / \partial x_1 & 0 \\ 0 & \partial N_i / \partial x_3 & \partial N_i / \partial x_2 \\ \partial N_i / \partial x_3 & 0 & \partial N_i / \partial x_1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{I}_{6 \times 6} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{E}_{ijkl} = \begin{bmatrix} E_{1111} & E_{1122} & E_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ E_{2211} & E_{2222} & E_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ E_{3311} & E_{3322} & E_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & E_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_{1212} \end{bmatrix} =$$

$$\frac{E(1-\mu)}{(1+\mu)(1-2\mu)} \cdot \begin{bmatrix} 1 & \frac{\mu}{1-\mu} & \frac{\mu}{1-\mu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\mu}{1-\mu} & 1 & \frac{\mu}{1-\mu} & 0 & 0 & 0 \\ \frac{\mu}{1-\mu} & \frac{\mu}{1-\mu} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1-2\mu}{2(1-\mu)} \end{bmatrix}$$

均质化问题式(24)可表示成矩阵形式:

$$\sum_e \int_s \mathbf{v} \mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B} \chi^{kl} |J| dz_1 dz_2 dz_3 = \sum_e \int_s \mathbf{v} \mathbf{B}^T \mathbf{E} \varepsilon_0^{kl} |J| dz_1 dz_2 dz_3 \quad (30)$$

由虚位移 $\mathbf{v}$ 的任意性可得

$$\sum_e \int_s \mathbf{B}^T \mathbf{E} \mathbf{B} \chi^{kl} |J| dz_1 dz_2 dz_3 = \sum_e \int_s \mathbf{B}^T \mathbf{E} \varepsilon_0^{kl} |J| dz_1 dz_2 dz_3 \quad (31)$$

即

$$[\mathbf{K}] \{\chi^{kl}\} = \{\mathbf{F}^{kl}\} \quad (32)$$

式(32)即为求解均匀化有限单元附加参数 χ^{kl} 的方程。 $[\mathbf{K}]$ 和 $\{\mathbf{F}^{kl}\}$ 分别为结构总体刚度矩阵和总体载荷矩阵, 可分别通过单元刚度 $[\mathbf{K}_e]$ 和单元载荷矩阵 $\{\mathbf{F}_e^{kl}\}$ 来集成。

$$[\mathbf{K}] = \sum_e [\mathbf{K}_e] = \sum_e \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 [\mathbf{B}]_{24 \times 6}^T [\mathbf{E}]_{6 \times 6} [\mathbf{B}]_{6 \times 24} |J| dz_1 dz_2 dz_3 \quad (33)$$

$$\{\mathbf{F}^{kl}\} = \sum_e \{\mathbf{F}_e^{kl}\} = \sum_e \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 [\mathbf{B}]_{24 \times 6}^T [\mathbf{E}]_{6 \times 6} \mathbf{T}^{kl} |J| dz_1 dz_2 dz_3 \quad (34)$$

式中: $\mathbf{T}^{kl}$ 为作用在单元边界上的力矩阵。

同理等效弹性模量式(21)的矩阵形式为

$$[\mathbf{E}^H] = \frac{1}{|Y|} \int_Y ([\mathbf{E}] - [\mathbf{E}][\mathbf{B}][\chi]) |J| dz_1 dz_2 dz_3 = \frac{1}{Q_{\text{Total}}} \sum_e \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 ([\mathbf{E}] - [\mathbf{E}][\mathbf{B}][\chi]) |J| dz_1 dz_2 dz_3 \quad (35)$$

式中: Q_{Total} 为所有单元体积之和。式(33)~(35)的积分可通过三维的8节点高斯积分公式求得。因此, 细观均匀化问题可化为具有初应力作用及周期性边界条件的空间有限元问题来求解, 针对单胞上不同的初应变受载模式, 采用相应的固定边界条件。

2 单胞的周期性边界条件

渐近均匀化理论要求细观单胞呈周期性排列, 周期性边界条件施加在单胞相互平行的边界上, HASSANI 等^[13-14]给出了周期性边界条件施加方式。在进行细观单胞有限元分析求解时, 细观单胞内广义位移 χ_i^{kl} 需要满足周期性边界条件, 即

$$\begin{aligned} \chi_i^{kl}(y_1, y_2) &= \chi_i^{kl}(y_1 + Y_1, y_2) = \\ \chi_i^{kl}(y_1, y_2 + Y_2) &= \chi_i^{kl}(y_1 + Y_1, y_2 + Y_2) \end{aligned} \quad (36)$$

这里, $i=1, 2$ 分别表示二维坐标的 y_1 和 y_2 两个方向。也就是说对于单胞边界上对称的两点 A 和 B (见图 2(a)), 有 $\chi_i^{kl}(A) = \chi_i^{kl}(B)$ 。对于二维问题, 细观均匀化问题(35)需解三次方程(对于三维问题需解六次方程)。该方法在处理位移和力边界条件方面有着很大的优越性, 即只用到广义位移 χ_i^{kl} 的周期性边界条件。对于一个具体的标准单胞来说, 上述边界条件的施加将会根据单胞变形的形式而不同。单胞的变形方式有以下3种况: 1) 在正方形单胞水平方向上作用单位初应变, 如图 2(b)所示, 其周期性边界条件的施加图 3(a)为取对称单胞 1/4 的状态; 2) 在正方形单胞垂直方向上作用单位初应变, 如图 2(c)所示, 其周期性边界条件的施加与第一种情况相同; 3) 在正方形单胞上作用单位初剪应变, 如图 2(d)所示, 其周期性边界条件的施加如图 3(b)所示, 取对称单胞 1/4 的状态。

3 分析与讨论

利用 Visual C++ 语言编写 Homo3D 均匀化程序来计算钨丝增强铅基块体非晶复合材料等效弹性常数。利用图 4 所示的有限元模型进行均匀化理论计算。在如图 4(a)所示的正方形单胞中, 基体和增强相都呈对称分布^[18]。图 4(b)所示的有限元模型中圆柱形增强相的半径为 R , 正方体基体的边长为 L 。设钨丝为横观各向同性材料, 弹性常数为 $E_W=410$ GPa, 泊松比 $\mu_W=0.28$, 块体非晶合金基体为各向同性材料, 弹性常数为 $E_{\text{BMG}}=96$ GPa, 泊松比 $\mu_{\text{BMG}}=0.36$ 。单元网格

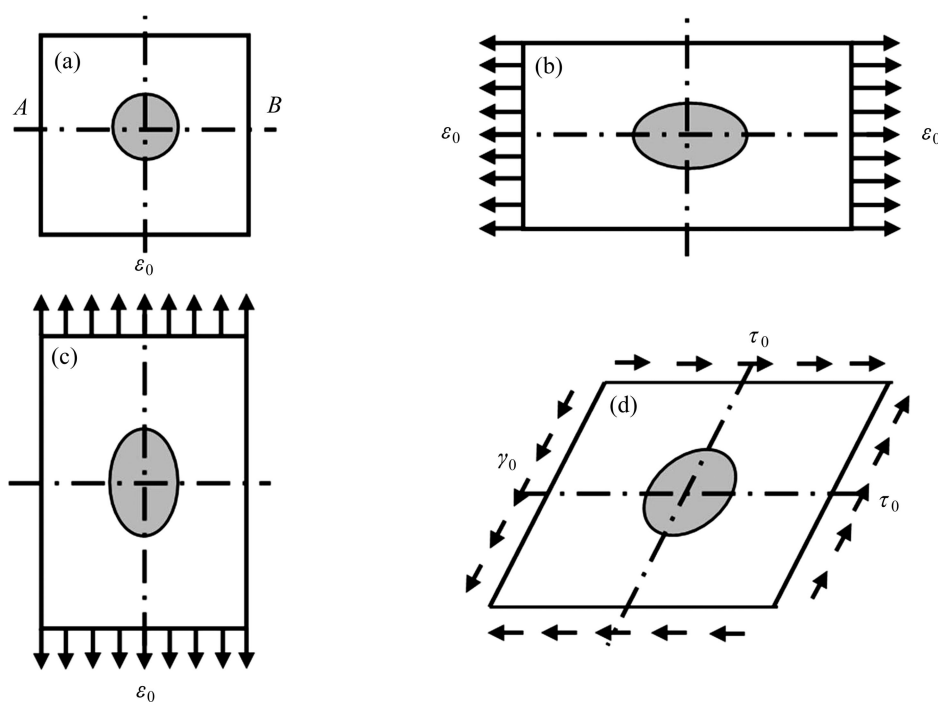


图 2 不同条件下周期性单胞的变形方式

Fig. 2 Different deformation modes for periodic unit cell under different conditions: (a) Unit cell structure; (b) Deformation induced by unit initial strain (ε_0) in horizontal direction; (c) Deformation induced by unit initial strain (ε_0) in vertical direction; (d) Deformation induced by unit initial shear strain (γ_0) or shear stress (τ_0)

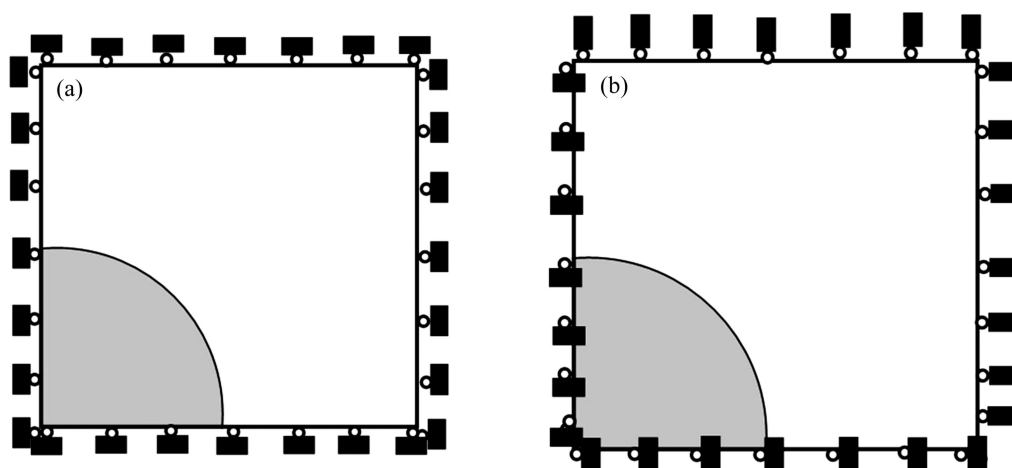


图 3 对应图 2(b)、(c)和(d)单胞施加的边界条件

Fig. 3 Boundary conditions corresponding to unit cells in Figs. 2(b), (c) and (d): (a) Boundary conditions for cases in Figs. 2(b) and (c); (b) Boundary condition for case in Fig. 2(d)

划分如图 4(b)所示, 考察增强相的体积分数(V_f)和微结构几何尺寸比值 R/L 对宏观力学性能的影响。

将不同体积分数下钨丝增强铅基块体非晶复合材料弹性模量的预测值(本文中建立的理论模型计算值, 用 Homo FEM 表示)与 Voigt 模型和 Reuss 模型^[21]的计算结果(分别用 Voigt 和 Reuss 表示)以及文献[22–26]

报道的实验值(Experimental results)进行比较, 如表 1 所列。Voigt 模型和 Reuss 模型公式^[21]如下:

$$\text{Voigt: } E_V^H = E_W V_f + E_{\text{BMG}} (1 - V_f) \quad (37)$$

$$\text{Reuss: } E_R^H = \frac{E_W E_{\text{BMG}}}{E_{\text{BMG}} V_f + E_W (1 - V_f)} \quad (38)$$

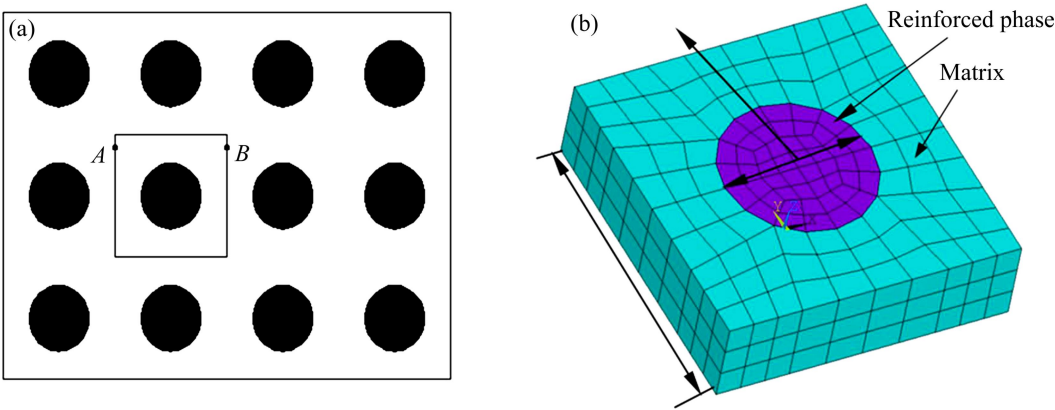


图 4 钨丝增强锆基块体非晶复合材料的周期性细观结构及其三维单胞网格模型

Fig. 4 Periodic microstructure (a) and three-dimensional grid cell model (b) of tungsten fiber reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites

式中: E^H 和 V_f 分别表示复合材料的等效弹性模量和钨丝体积分数。将计算结果作无量纲化处理即 E^H/E_W 、 μ^H/μ_{BMG} 和 E_{ijkl}^H/E_0 , 其中 $E_0 = \frac{E_W(1-\mu_W)}{(1+\mu_W)(1-2\mu_W)}$ 。钨丝增强锆基块体非晶复合材料的等效弹性模量与钨丝体积分数关系如图 5 所示。在代表性体积单元内, 单

表 1 不同体积分数钨丝增强锆基块体非晶复合材料弹性模量的预测值(Homo FEM)与文献报道的实验值及 Voigt 模型和 Reuss 模型的计算结果的比较

Table 1 Comparison of predicted elastic moduli (Homo FEM) of tungsten fiber reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites with different volume fractions of tungsten fiber with their experimental values from literature and calculated values based on Voigt and Reuss models

V_f / %	E /GPa			
	Homo FEM	Voigt	Reuss	Experimental result
10	127.1	127.4	103.9	127.8 ^[22]
15	142.4	143.1	108.4	130.6 ^[22]
17	148.5	149.4	110.4	166.9 ^[23]
20	157.7	158.8	113.4	160.4 ^[22]
26	175.9	177.6	119.9	185.9 ^[23]
37	209.5	212.2	133.9	220.5 ^[23]
40	218.7	221.6	138.4	235.2 ^[22]
45	233.9	237.3	146.5	146.4 ^[24]
60	279.7	284.4	177.6	286.9 ^[22]
61.4	283.9	288.8	181.2	293.0 ^[25]
68	304.1	309.5	200.3	312.0 ^[26]
80	340.7	347.2	247.9	343.1 ^[22]

个纤维增强情况下不同 R/L (不同体积分数)对整体等效弹性常数的影响如图 6 和表 2 所示。一定体积分数下不同 R/L 对整体等效弹性常数的影响如图 7 所示。

从表 1 和图 5 可以看出, 钨丝增强锆基块体非晶复合材料的弹性模量随着钨丝的体积分数的增加而增大, 用均匀化方法预测的结果处在 Voigt 模型和 Reuss 模型的结果之间, 且与 Voigt 模型近乎重合。Voigt 模型采用均匀应变场假设, 得到的等效弹性模量为真实等效弹性模量的上限, Reuss 模型采用均匀应力场假设, 得到的等效弹性模量为真实等效弹性模量的下限。

表 2 不同 R/L 下单相钨丝增强锆基块体非晶复合材料等效弹性常数的预测值

Table 2 Predicted equivalent elastic constants of tungsten fiber reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites with different R/L ratio values

R/L	E_{1111}^H /GPa	E_{1122}^H /GPa	E_{1212}^H /GPa	μ^H
0.178	191.3	96.1	47.6	0.334
0.219	207.7	100.3	53.7	0.326
0.233	214.4	102.1	56.1	0.323
0.252	224.7	105.1	59.8	0.319
0.288	245.3	111.2	67.1	0.311
0.343	284.3	123.5	80.4	0.303
0.357	295.1	126.9	84.1	0.301
0.378	312.9	132.7	90.1	0.298
0.437	367.3	150.6	108.3	0.291
0.442	372.3	152.3	110.1	0.290
0.465	396.4	160.3	118.1	0.288
0.505	440.2	174.9	132.6	0.284

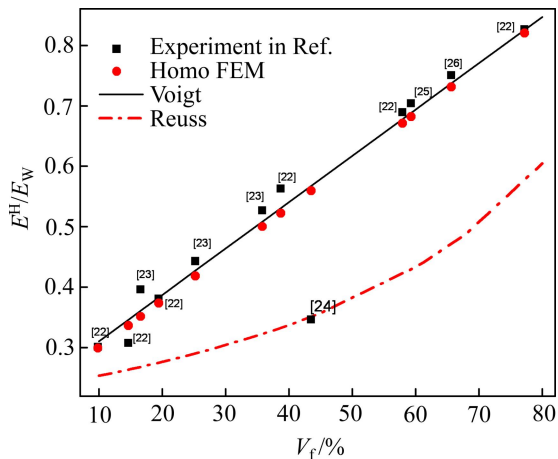


图5 复合材料等效弹性模量与钨丝体积分数关系

Fig. 5 Relationship between equivalent elastic modulus of composite and volume fraction of tungsten fiber

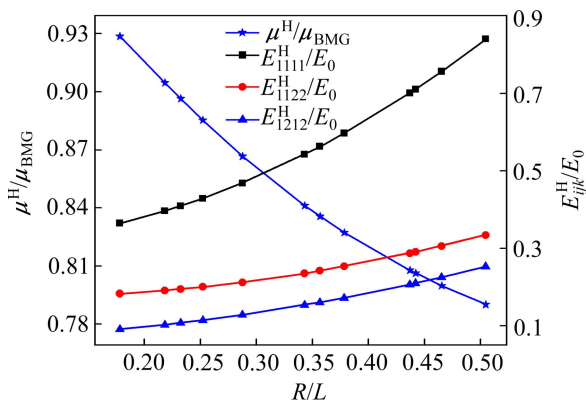


图6 单相钨丝增强下复合材料等效弹性参数与微结构尺寸比 R/L 的关系

Fig. 6 Relationships among equivalent elastic parameters and R/L ratio value under condition of single-phase tungsten enhanced

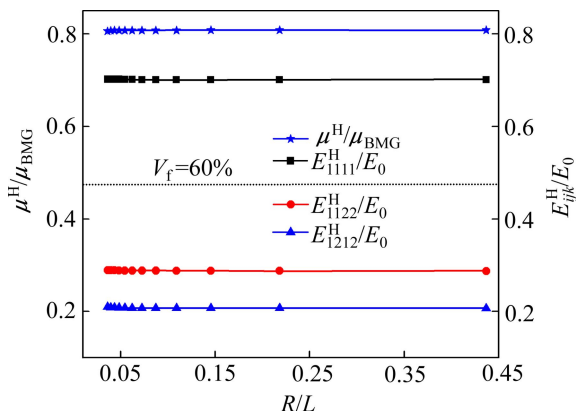


图7 多相钨丝增强且定钨丝体积分数(60%)时等效弹性参数与微结构尺寸比 R/L 的关系

Fig. 7 Relationship between equivalent elastic parameters of composites and R/L ratio value under condition of multi-phase tungsten enhanced and given volume fraction of tungsten fiber of 60%

说明使用均匀化方法预测非晶复合材料的等效弹性模量的合理性和正确性。预测结果与文献报道的实验数据基本吻合,但还存在一定差异,其原因可能是:钨丝增强钎基块体非晶复合材料并非完全线弹性材料,如基体钎基块体非晶合金像聚合物材料一样,具有黏弹性特征;有限元模型与实体模型存在差异;计算程序中解方程的方法存在误差。为减小与实验数据的差异,在进一步的计算中,尝试将基体的黏弹性能对整体弹性常数的影响考虑进去;选用高配置计算机,进行有限元建模,进一步细化单元网格;选用合适的解方程方法。

从图6和表2可以看出,在代表性体积单元内单相钨丝增强钎基块体非晶复合材料的等效弹性常数 E^H_{ijkl} (其中 E^H_{1122} 和 E^H_{1212} 分别等效于拉梅常数 λ 和 G) 随着微结构几何尺寸比值 R/L 增加而增大;而等效泊松比 μ^H 随着 R/L 的增加而减小。图7显示,代表性体积单元内钨丝体积分数一定(60%)而增强相数量不同时复合材料等效弹性常数 E^H_{ijkl} 随着微结构几何尺寸比值 R/L 的增加呈略微减小的趋势,但趋势不明显,近似于有限元单胞中含单相钨丝的计算值;等效泊松比 μ^H 随着 R/L 的增加略微增大,同样近似于有限元单胞中含单相钨丝的计算结果。因此,在给定钨丝体积分数时,单胞中钨丝相数量对整体弹性常数影响很小,可忽略不计。在实际工程计算中,只考虑有限元单胞中含单相钨丝情况下,不同微结构几何尺寸比值 R/L 对复合材料整体等效弹性常数的影响即可。

4 结论

1) 利用均匀化方法的三维有限元格式对钨丝增强钎基块体非晶复合材料的等效弹性常数进行预测,预测结果与实验数据相吻合,且均匀化方法与其他方法相近,是一种具有严格数学依据、高效而实用的方法,在预测钨丝增强钎基块体非晶复合材料等效弹性常数方面具有相对较强的优势。

2) 通过计算,研究了增强相的体积分数对钨丝增强钎基块体非晶复合材料宏观力学性能的影响,得到了合理的数值结果,并探讨了单相增强和多相增强情况下增强相的尺寸大小对复合材料的宏观力学性能的影响,得到了有意义的结论,为进一步确定钨丝增强钎基块体非晶合金的成分设计和微观应力,奠定了有力的理论基础。

REFERENCES

- [1] 张晓立, 王金相, 孙宇新, 付艳超, 刘家骢. 钨丝增强块体非晶复合材料的研究进展[J]. 稀有金属材料与工程, 2008, 37(8): 1323-1328.
ZHANG Xiao-li, WANG Jin-xiang, SUN Yu-xin, FU Yan-shu, LIU Jia-cong. Study progress of tungsten-fiber reinforced bulk metallic-glass matrix composites[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2008, 37(8): 1323-1328.
- [2] 柳林, 孙民, 谌祺, 刘兵, 邱春雷. Zr-Cu-Ni-Al-Nb 大块非晶合金的晶化行为、力学性能及电化学腐蚀行为的研究[J]. 物理学报, 2006, 55(4): 1930-1935.
LIU Lin, SUN Min, CHEN Qi, LIU Bing, QIU Chun-lei. Crystallization, mechanical and corrosion properties of Zr-Cu-Ni-Al-Nb bulk glassy alloys[J]. Acta Physica Sinica, 2006, 55(4): 1930-1935.
- [3] PEKER A, JOHNSON W L. A highly processable metallic glass $Zr_{41.2}Ti_{13.8}Cu_{12.5}Ni_{10.0}Be_{22.5}$ [J]. Applied Physics Letters, 1993, 63(17): 2342-2344.
- [4] 许福, 龙志林, 彭建, 张平. 块体非晶合金剪切带的原子力纳米压痕行为[J]. 中国有色金属学报, 2011, 21(6): 1444-1449.
XU Fu, LONG Zhi-lin, PENG Jian, ZHANG Ping. Atomic force microscope nanoindentation behavior of shear bands of bulk metallic glasses[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2011, 21(6): 1444-1449.
- [5] 杨元政, 董振江, 仇在宏, 陈小祝, 谢致徽, 白晓军. 块体非晶合金 $Cu_{58}Zr_{20}Ti_{20}Mo_2$ 的形成与力学性能[J]. 中国有色金属学报, 2007, 17(7): 1090-1095.
YANG Yuan-zheng, DONG Zhen-Jiang, QIU Zai-hong, CHEN Xiao-zhu, XIE Zhi-wei, BAI Xiao-jun. Formation and mechanical properties of $Cu_{58}Zr_{20}Ti_{20}Mo_2$ bulk metallic glass[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2007, 17(7): 1090-1095.
- [6] BRUCK H A, CHRISTMAN T, ROSAKIS A J, JOHNSON W L. Quasi-static constitutive behavior of $Zr_{41.25}Ti_{13.75}Ni_{10}Cu_{12.5}Be_{22.5}$ bulk amorphous alloys[J]. Scripta Materialia, 1994, 30(4): 429-434.
- [7] LONG Z L, SHAO Y, XIE G Q, ZHANG P, SHEN B L, INOUE A. Enhanced soft-magnetic and corrosion properties of Fe-based bulk glassy alloys with improved plasticity through the addition of Cr[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2008, 462: 52-59.
- [8] 马卫锋, 寇宏超, 李金山, 陈春生, 杜三明, 周廉, 付恒志. 钨丝增强 Zr 基非晶复合材料动态力行为及断裂特性[J]. 中国有色金属学报, 2008, 18(6): 1045-1050.
MA Wei-feng, KOU Hong-chao, LI Jin-shan, CHEN Chun-sheng, DU San-ming, ZHOU Lian, FU Heng-zhi. Dynamic mechanical behaviors and fracture characteristic of tungsten fiber reinforced Zr-based metallic glass matrix composites[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2008, 18(6): 1045-1050.
- [9] HILL R. A self-consistent mechanics of composite materials[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1965, 13(4): 213-222.
- [10] BUDIANSKY B. On the elastic moduli of some heterogeneous materials[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1965, 13(4): 223-227.
- [11] MORI T, TANAKA K. Average stress in matrix and average elastic energy of material with misfitting inclusions[J]. Acta Metallurgica, 1973, 21(5): 571-574.
- [12] 杨庆生, 陈浩然. 夹杂问题中的自洽有限元法和复合材料的平均弹性性能[J]. 复合材料学报, 1992, 9(1): 79-84.
YANG Qing-sheng, CHEN Hao-ran. Self-consistent finite element method for the problems of inclusion and the average elastic properties of composite materials[J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 1992, 9(1): 79-84.
- [13] HASSANI B, HINTON E. A review of homogenization and topology optimization I-homogenization theory for media with periodic structure[J]. Computer & Structures, 1998, 69: 707-717.
- [14] HASSANI B, HINTON E. A review of homogenization and topology optimization II-analytical and numerical solution of homogenization equations[J]. Computers & Structures, 1998, 69: 719-738.
- [15] 董纪伟, 孙良新, 洪平. 基于均匀化方法的三维编织复合材料等效弹性性能预测[J]. 宇航学报, 2005, 26(4): 482-486.
DONG Ji-wei, SUN Liang-xin, HONG Ping. Homogenization-based method for predicting effective elastic properties of three-dimensional braided composites[J]. Journal of Astronautics, 2005, 26(4): 482-486.
- [16] 付海雄, 马石城, 李晓全. 用渐近均匀化方法计算水泥土的等效弹性常数[J]. 湘潭大学自然科学学报, 2006, 28(1): 117-120.
FU Hai-xiong, MA Shi-cheng, LI Xiao-quan. Application of asymptotic homogenization theory to calculate the equivalent elastic constants of cement-soil[J]. Natural Science Journal of Xiangtan University, 2006, 28(1): 117-120.
- [17] 闫晓鹏, 牛卫晶, 王志华, 马宏伟. 基于均匀化理论的混凝土等效弹性模量的数值模拟[J]. 太原理工大学学报, 2011, 42(2): 212-214.
YAN Xiao-peng, NIU Wei-jin, WANG Zhi-hua, MA Hong-wei. Numerical simulation of equivalent modulus of concrete based on homogenization theory[J]. Journal of Taiyuan University of Technology, 2011, 42(2): 212-214.
- [18] DRAGOI D, ÜSTÜNDAG E, CLAUSEN B, BOURKE M A M.

- Investigation of thermal residual stresses in tungsten-fiber/ bulk metallic glass matrix composites[J]. *Scripta Materialia*, 2001, 45: 245–252.
- [19] 王勖成. 有限单元法[M]. 北京: 清华大学出版社, 2003: 46–47.
- WANG Xu-cheng. Finite element method[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2003: 46–47.
- [20] GUEDES J, KIKUCHI N. Preprocessing and post-processing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1990, 83: 143–198.
- [21] SHEN T K, HING P. Ultrasonic through-transmission method of evaluation the modulus of elasticity of $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-ZrO}_2$ composite[J]. *Journal of Materials Science*, 1997, 32: 6633–6638.
- [22] CONNER R D, DANDLIKER R B, JOHNSON W L. Mechanical properties of tungsten and steel fiber reinforced $\text{Zr}_{41.25}\text{Ti}_{13.75}\text{Cu}_{12.5}\text{Ni}_{10}\text{Be}_{22.5}$ metallic glass matrix composites[J]. *Acta Materialia*, 1998, 46(17): 6089–6102.
- [23] ZHANG H, ZHANG Z F, WANG Z G, QIU K Q, ZHANG H F, ZANG Q S, HU Z Q. Fatigue damage and fracture behavior of tungsten fiber reinforced Zr-based metallic glassy composite[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2006, 418: 146–154.
- [24] ZHANG H, ZHANG Z F, WANG Z G, ZHANG H F. Deformation and damage evolution of tungsten fiber reinforced metallic glass matrix composite induced by compression[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2008, 483/484: 164–167.
- [25] ZHANG B Y, CHEN X H, WANG S S, LIN D Y, HUI X D. High strength tungsten wire reinforced Zr-based bulk metallic glass matrix composites prepared by continuous infiltration process[J]. *Materials Letters*, 2013, 93: 210–214.
- [26] WANG G, CHEN D M, SHEN J, STACHURSKI Z H, QIN Q H, SUN J F, ZHOU B D. Deformation behaviors of a tungsten-wire/bulk metallic glass matrix composite in a wide strain rate range[J]. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2006, 352: 3872–3878.

(编辑 陈卫萍)