

中图分类号: TB33

论文编号: 10006SY0901114

北京航空航天大学
硕士学位论文

基于热物理参数的梯度材料
设计原则

作者姓名 范世通

学科专业 材料科学与工程

指导教师 王华明 教授

培养学院 材料科学与工程学院

Design Principles of Gradient Material Based on Thermophysical Parameters

A Dissertation Submitted for the Degree of Master

Candidate: Fan Shitong

Supervisor: Prof. Wang Huaming

School of Materials Science & Engineering

Beihang University, Beijing, China

中图分类号: TB33

论文编号: 10006SY0901114

硕 士 学 位 论 文

基于热物理参数的梯度材料设计原则

作者姓名	范世通	申请学位级别	工学硕士
指导教师姓名	王华明	职 称	教授
学科专业	材料科学与工程	研究方向	梯度材料
学习时间自	2009 年 09 月 10 日	起至	2012 年 01 月 14 日止
论文提交日期	2011 年 12 月 19 日	论文答辩日期	2011 年 12 月 15 日
学位授予单位	北京航空航天大学	学位授予日期	年 月 日

关于学位论文的独创性声明

本人郑重声明：所呈交的论文是本人在指导教师指导下独立进行研究工作所取得的成果，论文中有关资料和数据是实事求是的。尽我所知，除文中已经加以标注和致谢外，本论文不包含其他人已经发表或撰写的研究成果，也不包含本人或他人为获得北京航空航天大学或其它教育机构的学位或学历证书而使用过的材料。与我一同工作的同志对研究所做的任何贡献均已在论文中作出了明确的说明。若有不实之处，本人愿意承担相关法律责任。

学位论文作者签名：范世通

日期：2011年12月19日

学位论文使用授权书

本人完全同意北京航空航天大学有权使用本学位论文(包括但不限于其印刷版和电子版)，使用方式包括但不限于：保留学位论文，按规定向国家有关部门(机构)送交学位论文，以学术交流为目的赠送和交换学位论文，允许学位论文被查阅、借阅和复印，将学位论文的全部或部分内容编入有关数据库进行检索，采用影印、缩印或其他复制手段保存学位论文。

保密学位论文在解密后的使用授权同上。

学位论文作者签名：范世通

日期：2011年12月19日

指导教师签名：李

日期：2011年12月19日

摘要

梯度材料具有均质复合材料无法比拟的优点, 通过将金属、陶瓷、塑料等不同有机和无机物质的巧妙结合, 可以满足航天、国防等高新技术领域对材料提出的苛刻要求, 在许多工程领域都有广阔的应用前景。然而梯度材料固有的力学性能和热物理性能的不均匀性, 必然导致材料在温度变化时由于各组成部分膨胀不均匀而彼此相互约束产生热应力, 造成材料的整体性能下降甚至失效, 同时也给材料设计带来了很大的困难。因而, 以热应力缓和为目的的梯度材料优化设计显得十分必要。

本文首先采用有限元法计算了梯度层组成相为不同长径比的梯度材料热应力, 发现组成相形态对梯度材料 Mises 热应力有明显的影响, 最大 Mises 等效热应力随梯度层中组成相长径比 l/d 的增大而增大, 但当 l/d 大于一特定值时, 最大 Mises 等效热应力增加趋势减缓并逐渐趋于恒定。从热物理参数角度分析了梯度层组成相形态、梯度层层数和成分分布指数三个因素对热应力的影响规律, 表明三个因素对梯度材料最大热应力优化作用的实质在于均匀减小材料层间弹性模量差值 ΔE 和线膨胀系数差值 $\Delta\alpha$ 。采用正交分析的方法, 以准确的数量估计证明了梯度层厚度、梯度层体积分数和梯度层中组成相长径比三个热应力影响因素的作用, 以梯度层厚度最为显著, 次之为梯度层体积分数, 而梯度层组成相长径比相对较小。根据以上分析, 提出如下梯度材料设计原则:

- 1) 在工艺条件的允许下, 应选择尽量多的梯度层层数或者使梯度成分呈连续变化;
- 2) 根据材料的力学性能和尺寸要求, 选择尽量厚的梯度层厚度;
- 3) 在梯度层厚度和层数确定的条件下, 设计梯度层成分分布指数使各层间线膨胀系数差值 $\Delta\alpha$ 和弹性模量差值 ΔE 尽量接近;
- 4) 在符合材料力学性能要求下, 选择尽量小的梯度层组成相长径比。

关键词: 梯度材料; 热物理参数; 热应力; 有限元分析方法

Abstract

Gradient material has great advantages compared with homogeneous composite, which meet the stringent requirements in the high technique area of aerospace and national defense, by combining organic and inorganic substances (metals, ceramics, plastics, etc.), and has the extensive application prospect in many engineering fields. However, the mechanics properties and thermophysical parameters unevenness of gradient material not only leads to thermal stress causing by the constraint generated by unequal expansion of each parts varying with temperature, and causes a loss of performance of material even failure, but also brings great difficulties to material design. So, an optimization design of gradient material to mitigate thermal stresses appears very necessary.

Firstly, the thermal stress of gradient material with different aspect ratio of composition phases in the graded layers was simulated by finite element method in this paper. The effect of phase morphology on the von Mises thermal stress of gradient material was found obvious. The maximum von Mises thermal stress increases with decreasing aspect ratio, and increases gently with the aspect ratio below a certain value. And in the view of thermophysical parameters, the influence of phase morphology, the number of graded layers and the compositional distribution factor were studied. Results show that essential reason of optimal influence of the three factors on the maximum thermal stress is homogenizing the elastic modulus difference of adjacent layers. Secondly, it was proved that graded layer thickness has the most remarkable affect on thermal stress, and the influence of constituent phase volume fraction is obvious, but the affect of aspect ratio is not significant. In the end, based on the former analysis, design principles of gradient material are proposed as follows:

- 1) In the process conditions permit, choose more graded layers or make the component and structure change continuous.

2) According to the mechanics properties and dimension needs, thicker graded layer should be chosen.

3) Under the certain graded layers thickness and number, design an appropriate compositional distribution factor to homogenize the elastic modulus and coefficient of linear expansion difference of adjacent layers.

4) According to the mechanics properties requirement, choose a smaller aspect ratio of composition phases in the graded layers.

Key words: gradient material; thermophysical parameters; thermal stress; finite element method

目录

第一章 绪论	1
1.1 研究背景	1
1.2 梯度材料的设计思想和描述形式	2
1.3 梯度材料热应力研究的有限元法	4
1.3.1 概述	4
1.3.2 有限元法	5
1.3.3 有限元法的求解步骤	6
1.3.4 有限元法在梯度材料分析中的应用	9
1.4 梯度材料热应力的影响因素及国内外研究现状	9
1.4.1 基于热物理参数的梯度材料热应力影响因素	9
1.4.2 梯度材料有限元建模	10
1.4.2.1 梯度材料的几何建模	10
1.4.2.2 梯度材料单元选择及特性参数定义	11
1.4.2.3 梯度材料的网格划分	12
1.4.3 梯度材料热应力有限元建模研究现状	12
1.4.4 研究中所存在的问题	16
1.5 研究目的及内容	17
1.5.1 研究目的	17
1.5.2 研究内容	18
第二章 组成相形态对梯度材料热应力的影响	19
2.1 物理模型建立及边界条件	19
2.1.1 基本假设	19
2.1.2 几何模型的简化	19
2.1.3 有限元建模设计	20
2.1.4 热物性参数模拟及边界条件设定	22
2.1.5 模拟用材料的选择及边界条件设定	23
2.2 计算结果及讨论	23
2.2.1 几何模型的形状影响作用	23
2.2.2 端面 (YOZ 面) 等效热应力的分布	25

2.2.3 梯度材料的最大 Mises 等效热应力	27
2.3 基于热物性参数的热应力分析	28
2.3.1 梯度层弹性模量差值 ΔE 对最大 Mises 等效热应力的影响	28
2.3.2 层间热膨胀系数差值 $\Delta \alpha$ 对热应力突变值的影响	29
2.3.3 基于热物理参数的其他影响因素的分析	30
2.4 小结	31
第三章 多种热应力影响因素显著性分析	32
3.1 模型建立及边界条件	32
3.1.1 几何模型简化	32
3.1.2 热物性参数模拟	33
3.2 正交试验设计	34
3.3 计算结果及讨论	34
3.3.1 最大 Mises 等效热应力分布	34
3.3.2 三种因素对热应力的影响规律及显著性分析	35
3.3.3 三种因素最优选择	39
3.4 小结	39
3.5 基于热物理参数的梯度材料设计原则	40
结论	41
附录	42
参考文献	56
致谢	60
攻读硕士学位期间取得的科研成果	61

第一章 绪论

1.1 研究背景

梯度材料是 1987 年由日本科学家新野正之、平井敏雄等首先提出的新概念和新思想,其两侧由不同性能的材料组成,以应付苛刻的使用环境,而中间部分的组成和结构又是连续变化的,是其内部界面消失,以减小和克服结合部位的性能不匹配因素^[1]。陶瓷-金属梯度功能材料是日本科学家在以太空航行为中心的研究中大胆地提出的一个新概念。由于陶瓷与金属的热物理性能相差甚远,故在高温冷却的过程中,陶瓷和金属的界面上会形成较大的应力集中,导致涂层开裂、剥落,从而影响发动机的正常工作。自从功能梯度材料问世后,即可在燃烧室表面上制成金属基底的陶瓷/金属功能梯度材料作为热障涂层。其主要特点是在传统的陶瓷-金属复合材料中加上材料含量配比成梯度变化的中间过渡层,从而使材料的物理性能及热物理性能成渐变形式,这样可以避免或缓解传统陶瓷-金属复合材料由于物性差异太大而在使用过程中所产生的许多缺陷,如应力集中、开裂及剥落等现象。相对于传统的层状复合材料,也正是由于其组分的连续分布,梯度材料具有更优异的热机械性能^[2-3]。在技术科学领域里,随着人们对结构中和质量的要求越来越高,新材料、新工艺的不断涌现,梯度材料以其独特优势展现出日益广泛的应用前景和极高的使用价值。相对于在涂层中加入其他材料,梯度材料在热缓和结构和防腐涂层中具有越来越广泛的应用^[4]。

梯度材料的研究由材料设计、材料合成和材料性能评价三个部分组成。材料合成是梯度材料研究的核心,材料设计则是为梯度材料合成提供最佳的组成和结构梯度分布,材料性能评价则是建立准确评价梯度材料性能的一整套标准化试验方法,依此标准对梯度材料进行测试并将测试结果及时反馈给材料设计部门。三者紧密相关,相辅相成。目前材料设计多数采用逆设计系统。首先是按照对材料性能的要求和使用条件,然后查阅材料组成和构造的知识库,依据设计的基本理论,对材料的组成和结构的梯度分布进行设计。现时,一些新技术、新方法的应用给梯度材料的研究增添了无穷的活力。由于梯度材料的复杂性,而进行梯度材料组成分布的优化时往往要经过反复的计算,而且为了提高计算精度,连续组分

梯度材料就必须分成很多层,且每一层的材料参数都不同,在利用现有软件计算时,模型的建立和参数的输入是一项重复烦琐的工作,这使得梯度材料的计算机辅助设计系统成为强有力的分析工具^[5-8]。

1.2 梯度材料的设计思想和描述形式

对于不同的使用环境,传统的同一均质结构材料往往难以满足复杂的服役条件对零件苛刻的性能要求。然而,若简单地将满足不同使用条件的材料直接连接,当材料在制备和使用过程中发生温度变化时,又由于各组成部分的力学性能和热物理性能(如弹性模量、热膨胀系数、泊松比、热导率等)的不连续,必然导致材料各组成部分之间由于膨胀不均匀而彼此相互约束产生热应力。热应力过大和分布不合理往往会引起材料制备中的开裂和使用中的整体性能下降甚至失效。

梯度材料的产生就是为了解决这种对材料日益苛刻的性能要求,其设计思想是在材料的制备过程中通过连续控制材料的微观要素,使其组织及成分呈梯度分布,制备出内部无明显界面^[9]的非均质材料,达到缓和材料内部的热应力,同时又满足某些特殊的使用要求的目的。因此,从材料的结构角度来看,梯度材料与均一材料、复合材料不同,它是选用两种(或多种)性能不同的材料,通过连续地改变这两种(或多种)材料的组成和结构,使其界面消失导致材料的性能随着材料的组成和结构的变化而缓慢变化,所以梯度材料在结构上可以分为三层:两侧均一材料层和中间梯度层。

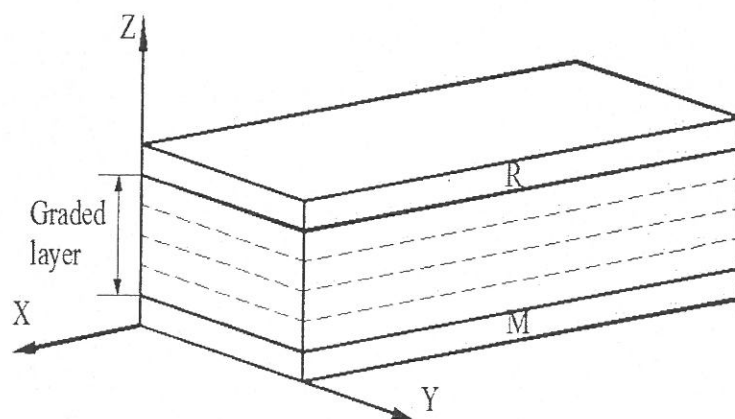


图 1 梯度材料的几何模型

但是,这类材料在制备过程中和服役条件下由于材料热弹性和热膨胀系数不均依然会产生残余热应力和工作热应力。因此,通过材料设计的手段,使这类材料的

组成分布达到最优，以减低热应力和使热应力分布最佳就显得尤其重要。

梯度材料的非线性分布，使得梯度材料由于缺乏不同组分不同分布的具体材料信息而难以描述^[10]，图 2 为梯度材料梯度层成分分布示意图。因此，学者们对此进行了大量的研究。文献[11]中，采用细观力学模型研究了随机离散结构与残余应力的内在联系，在各种层状梯度材料中考虑了晶体的塑性效应。通过与连续模型的比较表明，两种模型对应力集中、应变的宏观行为的具有相似的影响。

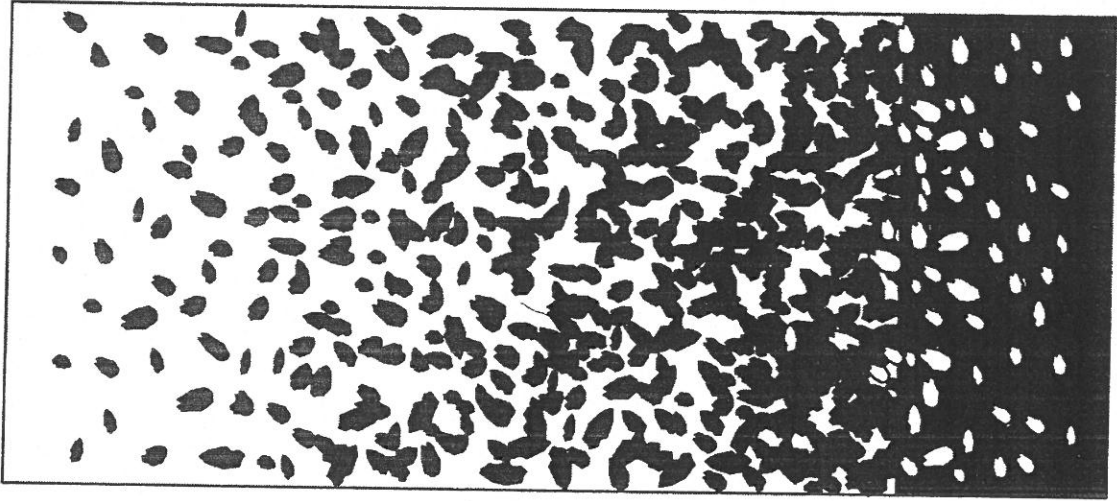


图 2 梯度材料梯度层成分分布示意图^[12]

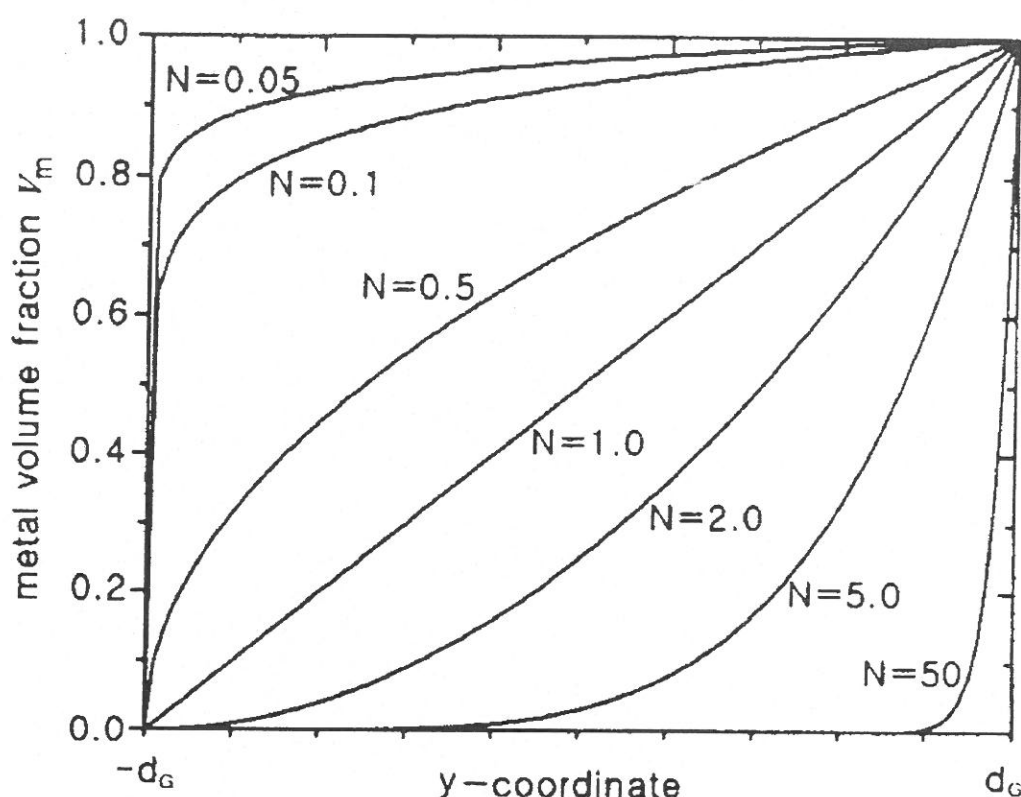
对梯度材料组成分布的描述，目前采用较多的是 Wakashima 等提出的用幂函数形式^[13]，如式 (1) 所示。如图 2 所示，式中 $f_1(x)$ 表示 B 相体积比， h 为梯度材料的总厚度， x 为梯度材料厚度方向的变量， p 称为梯度指数，通过改变 p 值大小可以改变 $f_1(x)$ 曲线的形状，如图 3，适当选取 p 值可以满足成分设计要求。当 $p=1$ 时，成分随着材料的厚度呈直线变化；当 $p<1$ 时，A 相和富 A 相的层变薄，B 相和富 B 相的层变厚；当 $p>1$ 时，则相反。

$$f_1(x) = \left[\frac{x}{h} \right]^p \quad (1)$$

也有采用 Markworth 等提出的一元二次函数的分布形式，如式 (2) 所示：

$$\varphi_1(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad (2)$$

式中， $a_i (i=0, 1, 2)$ 为可变参数。 a_1 值取决于约束条件和制备工艺。由于 $\varphi_1(0)=0$ ， $\varphi_1(d)=1$ ，所以 a_1 中只有一个独立变量，可选 a_1 或 a_2 。为保证 $0 \leq \varphi_1 \leq 1$ ， a_2 需满足 $-d^{-2} \leq a_2 \leq d^{-2}$ 。比较式 (1) 和式 (2) 可见，前者给定的组成分布可调范围大，而后者用于热应力解析计算比较方便。

图3 梯度材料的梯度成分分布曲线^[14]

1.3 梯度材料热应力研究的有限元法

1.3.1 概述

科学研究和工程技术中的很多物理问题都可根据专业知识抽象成数学表达形式——微分方程形式及其等效积分形式，这是解决物理问题的第一步。只有建立了所研究物理问题的数学描述，才能应用数学理论和数学方法分析求解，进而为物理问题的深入解决提供数据支持和决策支持。通常称物理问题的数学表达形式为物理问题的数学模型，而原始的物理问题成为物理模型。有关上述数学问题的求解长期以来一直是困扰科技工作者的难题，这类数学模型或者由于方程特征的非线性性质，或者由于求解域几何形状复杂，很难求得问题的解析解，只有少数简单问题能得到精确解答。解决这类问题的策略通常有两种。一是引入简化假设基本方程和定解条件简化为能够处理的问题，从而得到问题在简化状态下的解析解这种方法只能在有限的情况下可行，因为过分简化会导致不正确升值错误的解答。二是数值计算，求解数学模型在求解域上满足要求的近似解，这类解只在有限离散点（或区域）上满足基本方程和边界条件。即把求解无限自由度的解析解问题变成求解有限自由度的数值解问题。随着计算机技术的飞速发展，数值计

算方法已逐渐成为求解这类数学问题的主要途径。

常用的数值模拟方法，主要有解析法、差分法和有限元法^[15]。

解析法

解析法只能求解比较简单的问题，情况较复杂时，如梯度材料的非均匀分布、梯度层内热物性参数计算模型复杂等，采用解析法其计算量过大，往往难以求解准确的热应力场分布。同时，需要引入较多的简化假设条件，使结果的实用性和准确度降低。

差分法

差分法局限于规则的差分网格，对于复杂形状或复杂边界的物体，不易考虑符合实际情况的边界条件。

有限元法

有限元法抓住了单元的贡献，使得这种方法具有很大的灵活性和适用性。其单元选择比较随意，更适合于复杂形状的物体；对于多种材料组成的物体，可以利用分隔面的方式作为单元的界面；可以根据需要在局部进行细密的网格划分，使计算结果更加精确。目前有限元法在工程领域得到了广泛的应用，在梯度材料热应力分析中，学者们也大多采用有限元法。如周志光^[16]等人基于热弹塑性力学的有关理论，建立了轴对称热应力缓和型连续组分梯度材料的分析模型，还给出了一个设计实例，通过改变梯度材料的各项设计参数来实现残余应力和工作应力在梯度材料中的分布达到最优，该实例表明基于有限元软件的计算机辅助设计系统操作简便，设计结果合理可靠。

1.3.2 有限元法

有限元法是 20 世纪 50 年代以来逐步发展起来的一种新的数值方法，由于计算机技术的不断发展，有限元法的应用范围和应用水平都得到了很大的拓展和提高。在很多领域已成为科学研究和工程分析的一种重要的分析方法和手段。

有限元法的第一次成功的尝试是 1956 年波音公司的 Turner, Clough 等人在分析飞机结构时，将分片近似、整体逼近的思想和结构力学的矩阵位移法应用于弹性力学的平面问题，采用直接刚度法，按照弹性力学的基本原理建立了分片小区域（即三角形单元）上的特性方程，首次采用计算机求解，给出了用三角形单

元求得平面应力问题的正确解答。同时,德国斯图加特大学的 J.H.Argyris 发表了一组能量原理与矩阵分析的论文,并出版了《能量原理与结构分析》一书。它对弹性结构的基本能量原理进行了综合推广,是弹性结构分析的经典著作之一。1960 年 Clough 在题为“平面应力分析的有限元法”的论文中首次使用有限元法(the Finite Element Method)一词。此后这一名称得到了广泛承认,这一方法也被大量工程师开始用于处理结构分析、流体和热传导等复杂问题。

20 世纪 60-70 年代,是有限元迅速发展的时期,除力学界外,大量数学家也参与了这一工作。1963 年, J.F.Besseling, Melosh 和 Jones 等人证明了有限元法是基于变分原理的里兹法的另一种形式,有限元法计算格式可用变分原理建立,它可以处理很复杂的连续介质问题,是一种普通方法。60 年代后期, J.T.Oden 等学者进一步研究了加权残值法与有限元法之间的关系,利用加权残值法也可以确定有限元单元特性,建立有限元法的计算格式,并指出有限元法所利用的主要是 Galerkin 加权残值法,它可以用于即使泛函无法构造或泛函根本不存在的问题,如很多流体力学问题,从而进一步扩大了有限元法的应用领域。在此期间, O.C.Zienkiewicz、卞学璜、董平等人进一步推动了有限元的发展,分别提出了等参单元、杂交单元的概念。1967 年, O.C.Zienkiewicz 和 Y.K.Cheung (张佑启)出版了第一本有关有限元分析的专著《连续体和结构的有限元法》,此书是有限元法的名著,后更名为《有限单元法》;1972 年, J.T.Oden 出版了第一本处理非线性连续介质问题的专著《非线性连续体的有限元法》。从此,有限元法就以坚实的理论基础和完美的计算格式屹立于数值计算方法之林,被认为是一种完美无缺,和无所不能的方法。

有限元法经过几十年的发展,已成为一种通用的数值计算方法。它具有鲜明的特点,具体表现如下:(1)基本思想简单朴素,概念清晰易理解;(2)理论基础厚实,数值计算稳定、高效;(3)边界适应性强,精度可控;(4)计算格式规范,易于程序化;(5)计算方法通用,应用范围广。^[17]

1.3.3 有限元法的求解步骤^[17]

图 4 给出了有限元分析一般过程的结构示意,同时也反映了有限元分析系统与结构设计系统之间的关系,是当前所有流行商业化软件进行有限元分析与设计

的一般流程,通常将有限元分析过程分为有限元建模、有限元计算和有限元结果可视化三个阶段,也就是通常所说的前处理、有限元计算和后处理。

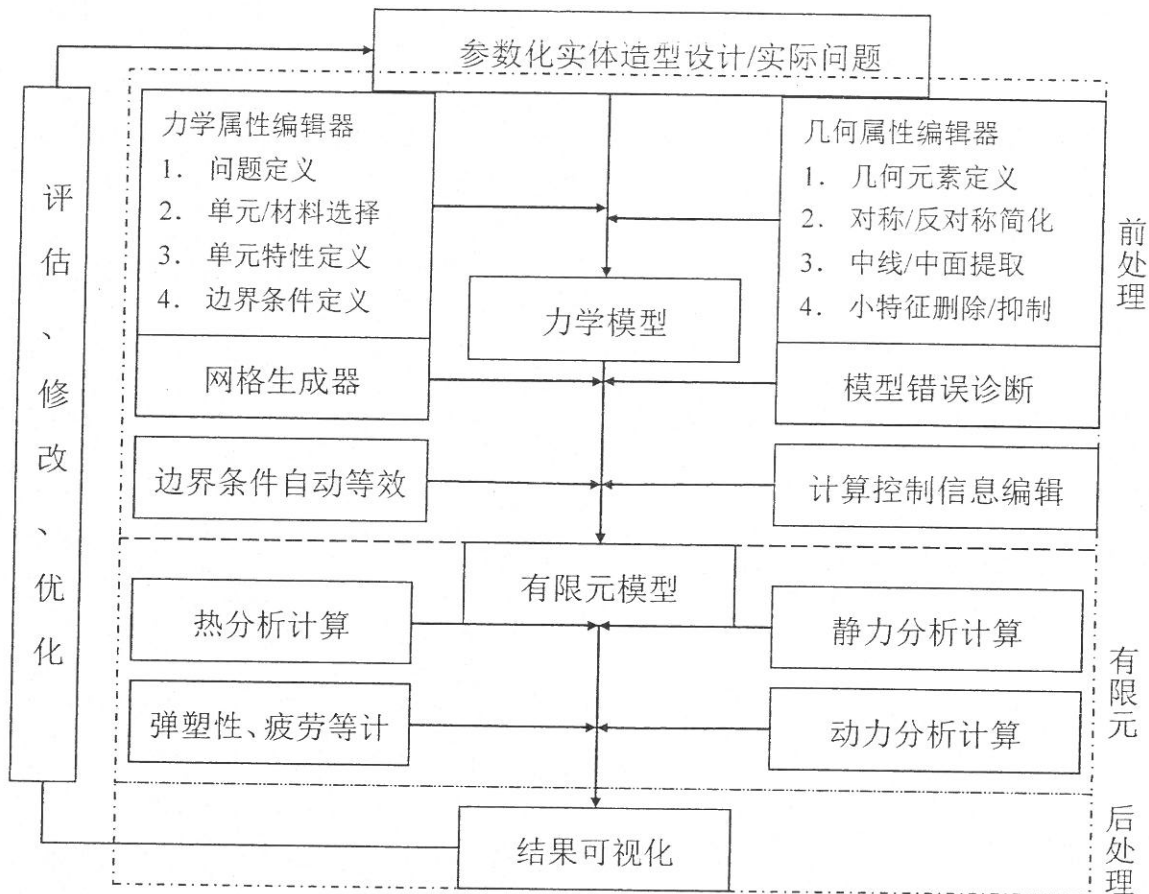


图4 有限元分析的一般步骤

从图4所示的有限元分析的一般过程可知,有限元建模的一般步骤可归纳如下:

(1) 问题定义: 问题定义就是建立所研究对象的力学模型,对有限元模型的参数进行分析定义。通常在进行有限元建模操作之前,必须对所研究对象的结构形式及特点、受力状态、边界约束、材料特性和计算要求等有比较透彻的理解,对其结果的分布规律有一定的预估。只有掌握了问题特征地本质才能建立正确、合理的有限元模型,进行问题定义时应明确分析对象的机构类型及结构形式、分析类型和计算目的及要求。

(2) 几何建模: 几何建模是对所研究对象形状和尺寸的描述,即力学模型的求解域的几何描述。建立几何模型时,应根据对象的具体特征对形状和大小进行必要的简化、变化和处理,以适应有限元分析的特点。

(3) 单元定义: 网格划分之前必须进行单元定义, 它包含单元类型选择和单元精度选择两个部分内容。单元类型选择主要考虑结构的受力特征, 与所确定的力学模型密切相关, 常见的单元类型有杆、梁、板、壳、平面、实体等结构化单元, 也有弹簧单元、间隙单元、耦合单元等非结构单元。不同的单元类型又具有不同的力学性能和作用。实际使用中, 必须根据问题性质和建模要求进行合适选择。

(4) 单元特性参数定义: 单元特性参数是指单元的材料特性、物理特性、辅助几何特征、截面形状等, 如表征材料特性的弹性模量、泊松比等, 反映梁杆单元截面特性的截面积、惯性矩等, 反映板壳单元几何特性的厚度, 弹簧单元的刚度, 等等。

(5) 网格划分: 网格划分就是离散力学模型的求解域, 是有限元建模的关键工作, 也是工作量最大、耗时最多的一个环节。网格划分的关键是网格划分方案的确定, 即网格的布局、密度的控制、质量的控制, 以及不同单元网格的拓扑相容处理等。一旦确定了划分方案, 就可以利用有限元建模软件提供的自动或半自动网格划分工具进行划分, 生成节点和单元信息。

(6) 边界条件定义: 边界条件反映了分析对象与外界之间的相互作用。建立正确合理的边界条件一般需要两个环节, 一是对边界条件进行量化, 即将边界条件表示为模型上可以定义的数学形式, 这部分工作有时可能很复杂, 往往需要借助经验和一些实验数据。第二个环节是将量化的边界条件转化到有限元模型的节点上去, 如节点的载荷和节点位移约束等。

(7) 模型检查: 模型检查是对前面一系列操作所产生的有限元数据模型的合理性和正确性进行检查。如节点号是否唯一、坐标是否正确、编号和约束施加是否合理, 单元类型、阶次、形状、分布、特性参数以及不同单元连接是否合法等; 这些检查有的必须依靠分析人员的经验, 有的可借助有限元建模工具进行; 模型检查是非常重要的, 不合理的有限元模型将影响有限元计算的精度和时间, 产生不合理的计算结果, 严重时将无法计算。

(8) 求解控制参数定义: 求解控制参数的定义是指有限元过程中各种参数的设置, 因为一种有限元模型可以用于多种分析目的, 计算时也可以采用不同的

计算方法。

1.3.4 有限元法在梯度材料分析中的应用

有限元法对于研究材料的力学分析特别是内应力、热应力以及残余应力等都是非常有效的方法。由于梯度材料的非均匀分布,目前对梯度材料的研究主要采用有限元数值模拟与材料学的有关理论相结合的方法。采用有限元法对梯度材料的研究主要有两个方面,一是对梯度材料的力学行为进行研究^[18-28];二是以缓和热应力为目的的梯度材料优化设计。采用有限元方法研究梯度材料中的热应力时,首先建立梯度材料的成分分布函数,然后建立有限元模型,利用混合律等法则确定材料的物理性能参数(如热导率 k ,线膨胀系数 α ,弹性模量 E 、泊松比 ν 等),采用计算机程序计算。日本科学家采用这种方法研究了 Ti-Ni 梯度材料的组成分布和热应力最大值之间的关系。因此,采用有限元方法可以优化设计梯度中间层的厚度、层数以及最佳成分分布情况。对实际非均匀介质,要得到热应力分布的解析解几乎是不可能的,而有限元法是解决此类问题的最有效方法。有限元法在材料加工过程的数值模拟技术中得到了广泛的应用,但当网格高度畸变时,有限元法有着一定的局限性^[13]。

1.4 梯度材料热应力的影响因素及国内外研究现状

1.4.1 基于热物理参数的梯度材料热应力影响因素

梯度材料的设计思想是制备梯度层组分呈连续分布的材料,然而在材料的制备生产中要实现材料的完美连续分布几乎是不可能的。因而,梯度材料的制备和研究中往往把梯度层划分为若干层,也就不可避免的会在温度变化时产生热应力。这种热应力的产生的根本原因还是热物理参数的不匹配,从本质上分析,梯度材料是通过控制热物理参数的连续性才能达到热应力的缓解的目的,故任何影响梯度层热物理参数分布的因素都会对梯度材料热应力造成一定的影响。梯度层层数、梯度层厚度、梯度分布指数等因素直接决定了梯度材料梯度层热物理参数的分布,对梯度材料热应力具有重要的影响,这也是目前国内外研究最多的影响因素。同时,通过控制两组分梯度材料的两相及两相的体积分数、形状和分布,甚至材料成型工艺等因素也能达到热应力优化的作用^[29]。而以上这些因素都可以在有限元建模中直接设定。

1.4.2 梯度材料有限元建模

如前所述,有限元分析分为前处理、有限元计算和后处理三个阶段,而热应力的各影响因素在有限元分析中的体现都集中在前处理阶段。实际上,在排除人为操作失误的条件下,有限元计算和后处理对热应力也是没有影响的。所以,有限元分析的前处理即有限元建模直接影响计算结果。学者们研究方法的不同也即是有限元建模的不同。如图3所示,有限元建模的8个步骤中对梯度材料的热应力有着至关重要的影响的步骤主要有:几何建模,单元选择及特性参数定义和网格划分。

1.4.2.1 梯度材料的几何建模

几何建模就是建立力学模型求解域的几何模型。几何模型简化主要是对结构中对力学性能影响小、导致网格划分困难的几何元素和结构进行修改和剔出,以便随后的网格划分更加简单、方便,有利于减小有限元模型的规模。梯度材料常见有两种形状,平板形(图5)和圆盘型(图6)。

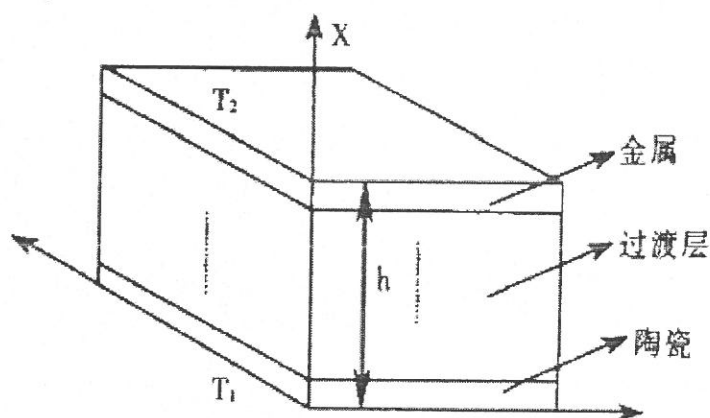


图5 平板模型

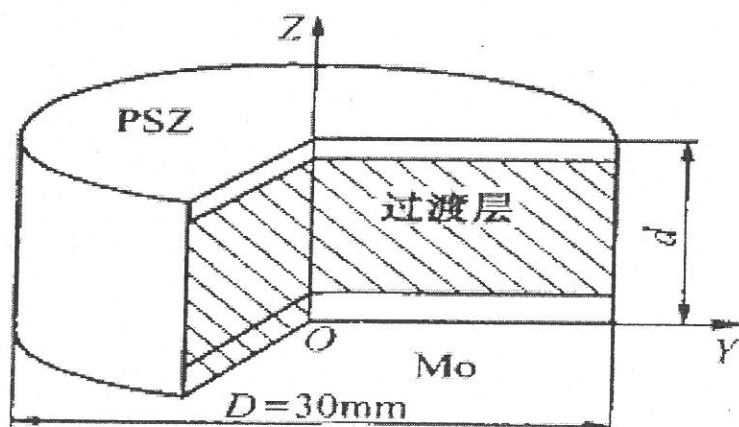


图6 圆盘模型^[30]

1.4.2.2 梯度材料单元选择及特性参数定义

单元选择是有限元计算中极其重要的问题,它包括单元类型的选择和单元精度的选择两个方面的内容。从有限元理论可知,单元类型是因研究对象的力学特性不同而定义的,如杆、梁、板、壳单元类型因为分析对象的一个方向的结构尺寸比其他方向的小很多,在分析其变形和应力是可以引入一定假设来简化问题,其定义来自结构力学。在梯度材料研究中,常用的单元类型有平面单元、板单元、实体单元及轴对称单元。

平面单元适用结构的几何特征为平板厚度相对于其他两个方向的尺寸可以忽略不计。平面单元只能承受作用于平面内的载荷的作用,不能承受垂直于平面的力和弯矩作用。板单元常用于平板厚度远小于其他两个方向的尺寸,受垂直于平板载荷及弯矩作用的结构。实体单元是连续结构最一般的有限元单元,可用于任何形状和受力条件的几何结构。轴对称单元常用于满足轴对称问题的结构,即几何形状和作用于其上的载荷及边界条件关于轴线对称的结构。^[17]

在梯度材料建模中,单元特性定义主要是指单元的材料特性定义即定义分析对象的材料力学、热学等方面的特性。严格的说,获得反映实际材料特性的参数很困难,因为材料的本构关系复杂,不同的本构关系需要提供不尽相同的描述参数,且这些参数往往需要从足够多次的试验中归纳才能获得。描述梯度材料特性的参数有弹性模量、泊松比、热膨胀系数、导热系数等。

在梯度材料的设计^[13]中,所需要的热物理参数数据和有关的数学模型及其热应力解析方法是主要研究解决的内容。梯度材料的热物理参数,主要取决于梯度层中的组成和微观结构。目前,梯度材料热物理性能参数的推定方法主要有三种:实测法、复合法则法和微观力学法。实测法试样的取样和测试都很复杂,一般不采用。复合法则可半定量的确定不同混合比例复合材料的热物理性能参数。而最简单和常用的混合律为线性混合律^[31],如下式所示:

$$P = \varphi_1 P_1 + \varphi_2 P_2 \quad (3)$$

式中, P 为梯度材料的热物理参数; P_1 、 P_2 分别为组分 1 和 2 的热物性参数; φ_1 、 φ_2 分别是组分 1 和 2 的体积分数。一般的表达式为:

$$P = \varphi_1 P_1 + \varphi_2 P_2 + \varphi_1 \varphi_2 Q_{12} \quad (4)$$

式中, Q_{12} 是 P_1 、 P_2 、 φ_1 、 φ_2 有关的函数。

复合法则法虽然比较简单, 但不够精确, 对材料微观结构对物性的影响没有反映出来, 所以提出了微观力学法。微观力学法分为二相平均场理论和三项平均场理论, 是最精确的方法, 缺点是计算比较麻烦。

1.4.2.3 梯度材料的网格划分

网格划分是有限元建模过程中最重要, 也是工作量最大的环节。网格的质量和数量直接影响有限元分析的精度、成本乃至成败。有限元网格的形状, 大小, 疏密等是影响有限元分析结果的重要因素。一般来说, 网格越密越多、计算精度越高, 但网格越多, 计算量越大, 对计算机存储空间的要求越大。因此, 网状划分应在保证必要精度的条件下, 网格疏一些, 只是整个网格划分的数量最少。通常的疏密原则是应力梯度大的区域网格密, 精度要求高的计算网格密; 反之网格尽可能疏一些。凡是感兴趣、认为重要的部位或应力梯度大的区域网格划分密一些, 而不关心的, 认为不重要的部分或应力梯度小的区域网格划分疏一些。

1.4.3 梯度材料热应力有限元建模研究现状

目前国内外对梯度材料的研究多集中在优化方面, 即找出使热应力最小的梯度层厚度、梯度层层数、体积分布系数等^[31-35]。学者们采用有限元方法研究梯度材料中的热应力时, 首先针对梯度材料的成分分布建立有限元几何模型, 利用混合律等复合材料法则确定材料的热物理性能参数 (如热导率 k , 线膨胀系数 α , 弹性模量 E 、泊松比 ν 等), 采用计算机程序计算, 最后得出热应力最小的各影响因素条件。因此, 采用有限元方法可以优化设计梯度中间层的厚度、层数以及最佳成分分布情况。

陈福义等^[36]建立了圆盘型 MgO/Ni 梯度材料模型: 几何尺寸为厚 6 mm, 直径 30 mm, 样品厚度方向上均匀分为 15 个成分层, 如图 7, 由于对称, 取几何形状的一半作计算, 假设界面上是理想接触, 样品从 1000℃ 均匀降温到 25℃, 对称面上的位移是零, 外表面是自由的。单元类型为四节点轴对称单元, 沿轴向分为 60 个节点, 沿径向分为 30 个节点, 在接近表面的地方和陶瓷层内使用细的有限元网格。单元中心的应力通过四个节点的应力平均而来。每层的体积分数由成分分布函数 $C=[(h-x)/d]^p$ 确定, h 是样品的厚度, x 是每层中心的轴向距离, d 是

样品的直径, p 是分布指数, 相应各层的材料性质有材料性质和体积分数的关系由线性插值确定, 分析过程中不考虑材料性质随温度的改变和金属的塑性。数值模拟了 $p=0.6\sim 2.8$ 之间的热应力分布, 发现 $p=1.8$ 时, 热应力取最小值, 最大应力分布在梯度材料的富 Ni 侧。综合考虑材料强度和热应力, 得到的最优成分分布指数为 $p=1.1$ 。

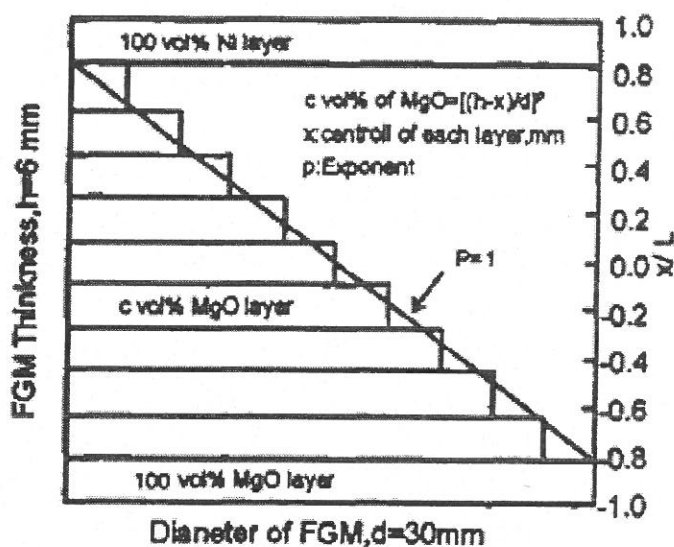


图 7 模型几何示意图和成分分布^[36]

李云凯等^[37]建立了圆盘型 PSZ/Mo 梯度材料模型, 梯度材料几何形状如图 6 所示。其成分分布函数可采用幂函数形式: $f(z) = (z/d)^p$ 式中 $f(z)$ 为陶瓷相的体积分; z 及 d 分别为各中间层的位置坐标和梯度层的总厚度; p 是成分分布因子。采用矩形轴对称单元对试样的 1/2 进行有限元网格划分。中心轴与底面交点为坐标原点, 单元划分采用适当的网格大小。制造过程中产生的残余应力的计算方法: 采用热弹性模型, 假设材料在冷却过程中无塑性变形, 计算从梯度材料的制备温度(1700℃)到室温冷却过程中产生的残余应力。隔热状态产生的热应力计算: 假设陶瓷侧温度为 1200℃, 金属侧温度为 450℃, 先进行温度场的计算, 然后计算产生的热应力。PSZ/Mo 系复合材料的物理性能参数处理: 用阿基米德法测量密度(6 个试样的平均值); 三点弯曲法测量弹性模量(6 个试样的平均值); 石英热膨胀仪测量膨胀系数(3 个试样的平均值)。在有限元计算时, 其它成分的物理性能值采用插分的方法求得。数值模拟结果表明: 层厚为 1 mm, 层数为 6 层, 形状分布因子为 1.6 的 PSZ/Mo 系梯度材料中的最大径向应力和最大轴向应力最小, 可作为 PSZ/Mo 系梯度材料的较佳成分分布。

程军等^[38]建立了 SiC/Al 系梯度材料平板模型, 如图 8 所示, 材料为具有四层梯度成的 SiC/Al 梯度材料, 碳化硅体积含量分别是 70%、55%、40%、25%。静力分析中选用三维实体单元 SOLID45, 均匀划分整个模型, 单元尺寸控制为 1 mm。数值计算中需要的各层材料的物理性能参数由式 (5) 求得, 其中, f 为两种材料的各自体分比, 下标 1 表示碳化硅, 下标 2 表示铝合金, q 为经验值 4 500 MPa。并将数值模拟结果与实测值对比发现: 采用云纹干涉法所测试的实验数据与有限元数值模拟结果相吻合。

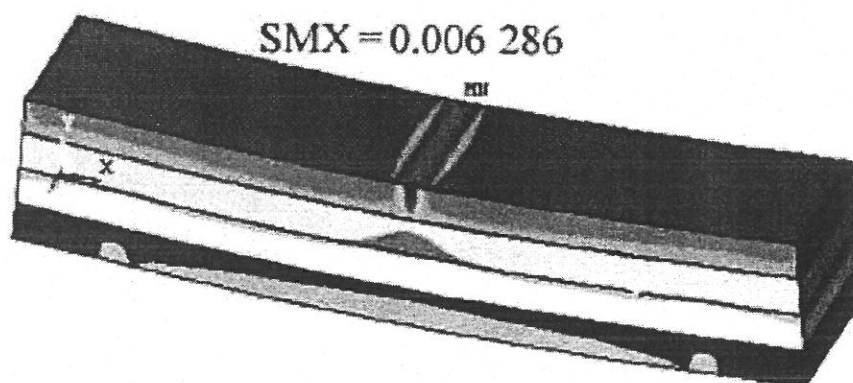


图 8 SiC/Al 系梯度材料有限元模拟

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1 + f_2 = 1 \\ \mu = \mu_1 f_1 + \mu_2 f_2 \\ E = \frac{f_2 E_2 \frac{q + E_1}{q + E_2} + f_1 E_1}{f_2 \frac{q + E_1}{q + E_2} + f_1} \\ \alpha = \alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2 \\ k = k_1 f_1 + k_2 f_2 \end{array} \right. \quad (5)$$

Williamson 等^[39]建立了 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ 梯度材料模型, 采用线型混合规则计算材料的物性参数。利用梯度层呈完全线性分布的梯度材料与非梯度材料的比较, 研究了如图 9 所示三种模型几何形状对梯度材料热应力的影响, 认为几何因素对梯度材料残余热应力有显著的影响。

王红卫等^[40]建立了 $\text{Ti}_6\text{Al}_4\text{V}-\text{TiN}$ 系生物梯度材料平板模型, 梯度成分分布采用幂函数法则, 材料物理性能参数采用复合法则, 对其热应力进行了数值模拟, 得到了 $\text{Ti}_6\text{Al}_4\text{V}-\text{TiN}$ 系梯度材料的最优热应力缓和参数为: 成分分布系数 $n=1.8$;

梯度层层数 $N=10$; 梯度层厚度 $t=0.015\text{mm}$ 。

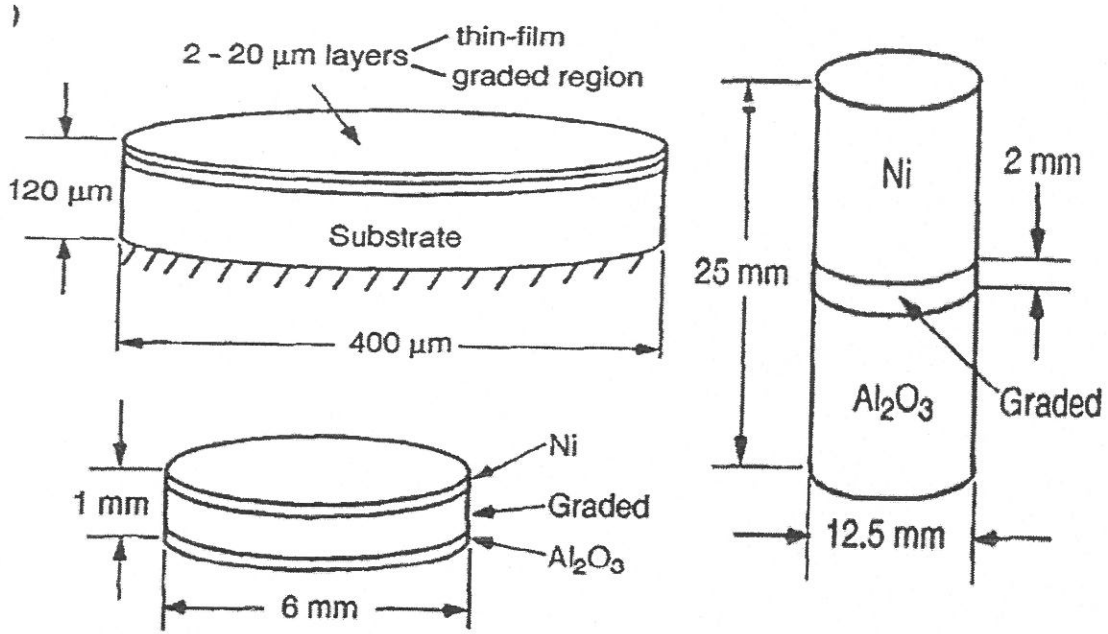


图 9 $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Ni}$ 梯度材料三种不同的几何模型

凌云汉等^[41-42]、陶光勇等^[43]、刘彬彬等^[44]分别建立了 W/Cu 梯度材料平板模型，对 W/Cu 梯度材料进行了优化设计。凌云汉假设球形颗粒均匀分布在各向同性均质基体中，各梯度的物性参数用经典的适用于颗粒弥散微观模型的 Kerner 混合法则计算得出。忽略层间的接触热阻和两端面的热对流，梯度材料的整体等效热导率由下式确定：

$$\frac{1}{K_{eqv}} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \delta_i} \left(\frac{\delta_1}{K_1} + \frac{\delta_2}{K_2} + \dots + \frac{\delta_n}{K_n} \right) \quad (6)$$

式中 δ_n 为第 n 层的梯度材料厚度， K_n 为第 n 层材料的热导率（由 Kerner 混合法则计算）； K_{eqv} 为整体梯度材料的等效热导率。假设以上各层材料各向同性，不随温度变化，无塑性变形，运用 ANSYS 有限元分析软件对 W/Cu 梯度材料进行热应力缓和优化设计。数值模拟结果发现不同的成分分布指数，梯度层厚度、过渡层数，以及表面层厚度均对 W/Cu 梯度材料的表面工作温度和各种热应力的大小和分布有重要影响，当 $p=1.0-1.2$ ， $n>4$ ，W 层厚度为 1 mm 的 W/Cu 梯度材料有较好的热应力缓和效果。陶光勇假设梯度材料按幂函数形式分布，采用 Reuss 法则^[45]计算物性参数，采用均匀的网格划分方式，计算了 W/Cu 梯度材料的热应

力,发现成分指数为1时热应力最小,梯度层层数大于6时热应力较小,梯度层厚度越大缓和热应力越有利。刘彬彬将梯度层划分为若干固定组成的复合层,采用 Paul 预测式^[46]计算弹性模量、采用 Kerner 预测式^[47]估算热膨胀系数,分析了三层梯度结构 W/Cu 材料各层成分与厚度对制备过程中所产生的热应力的影响,对于四层、五层结构的 W-Cu 梯度材料,分析了各层等厚结构时的成分分布与热应力的关系。结果表明:三层梯度结构 W-Cu 材料的各层厚度发生变化时,中间过渡层的最佳成分不同;均厚的三层结构应力缓和效果最好;随着梯度结构层数的增加,应力缓和效果增强,但增强的趋势由明显变为平缓。

由以上国内外研究可知,目前对梯度材料热应力的研究有以下共同点:

- (1) 研究对象为两种具体材料组合的梯度材料的宏观影响因素,如梯度层厚度、梯度层层数、梯度层成分分布指数以及两侧纯材料层厚度。
- (2) 研究中采用的几何模型大多为板状和圆盘状。
- (3) 梯度材料的有限元模拟的网格划分方式多采用均匀的网格划分。
- (4) 梯度层热物性参数多采用各类复合材料法则进行预测或实测法。

梯度材料热应力的宏观影响因素的研究结果可总结如下:

- (1) 几何因素对梯度材料热应力有影响。
- (2) 不同组成材料的成分分布指数对梯度材料热应力的影响不同,最优成分分布指数约为大于1且小于2。
- (3) 梯度层层数越多热应力越小,且层数大于一定值时热应力缓和效果减弱。
- (4) 梯度层厚度越大热应力越小。

1.4.4 研究中所存在的问题

梯度材料热应力是由于热物理参数的不连续,而温度变化时材料膨胀或收缩时变形受阻所致,其产生的根本原因在于热物理参数的不匹配。而目前国内外的研究中,多侧重于对具体两组分梯度材料热应力的优化,仅仅注重具体材料的优化结果,很少从热物理参数的角度对各种影响因素的影响规律进行理论分析。其次,梯度层组成相的形态也对梯度层的热物理参数具有不容忽视的影响,必定影响着梯度材料的热应力。而目前国内外对梯度材料热应力的研究中,对梯度层层数、厚度及梯度分布指数等宏观影响因素考虑较多,对梯度层相的形态对热应力

的影响的研究鲜有报道。

同时,各种因素对梯度材料热应力的影响是有主次之分的,以往的研究中多采用大量实验的方法对各因素的影响规律进行分析,以目测的方法选择最优的方案,而缺少对各种因素显著性的理性判别。

在有限元建模中,对单元特性定义多选择复合法则描述模型物理特性参数,且多采用线性混合律等各种复合材料法则,仅考虑体积分数的影响而没有考虑材料微观结构的影响。线性混合律虽然简单,但却不精确。一般认为仅在两组分热膨胀系数差值小于 $1 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ 时,线性混合律是经典的^[48],而且线性混合律也不能准确地反映材料微观结构对物性的影响。网格的划分方法多采用均匀网格划分,然而各层间,热应力大小不一,对于热应力集中层,若采用与热应力较小层等同的网格划分方式,将难以准确的反映热应力的分布情况。如要建立更准确地有限元模型,应根据各材料的实际微观结构合理的建立物理特性。计算模型,并根据一次计算结果,对几何模型进行二次网格划分,得到更准确地应力分布结果。

1.5 研究目的及内容

1.5.1 研究目的

梯度材料是一种多相材料,在材料的制备过程中通过连续地控制各组份含量的分布,使材料宏观特性在空间位置上呈现梯度变化,从而满足结构元件不同部位对材料使用性能的不同要求,达到优化结构整体使用性能的目的。梯度材料的结构中各组份相呈连续变化,不存在明显的界面,相应的热力学性能和物理性能也呈现梯度变化的形式。通过对梯度材料进行剪裁,可设计出理想的功能梯度复合材料及结构,使高温条件下两种材料之间热膨胀失配导致的热应力得到很大程度的缓解。现在梯度材料已经拓展到各种材料体系,在许多工程领域都有广阔的应用前景^[49]。

在梯度材料与结构的设计、制造与服役过程中出现了大量富有挑战性的力学研究课题。固有的材料性能不均匀性,给力学分析带来了很大的困难,以往针对均匀材料引入和发展的力学概念、理论、计算方案和实验手段,有许多已不再适用于梯度材料,需要进行探索和创新^[49]。

本文的研究目的是研究梯度材料热应力的影响因素的影响规律,首先确定梯

度层组成相形态对梯度材料热应力的影响规律并基于热物理参数进行分析,其次对各因素影响的显著性进行准确的数量估计,最后得出以缓和热应力为目的的梯度材料设计原则。

1.5.2 研究内容

1. 建立梯度层组成相为不同长径比的平板状 W/Ti 梯度材料物理模型,选择合理的热物理参数计算方法,设计梯度材料有限元计算程序,计算梯度材料从 500℃ 冷却至室温 25℃ 的热应力。
2. 对热应力分布进行分析,考察热应力分布状况,分析形状、尺寸对热应力的影响,并找出热应力最大的位置。
3. 分析组成相长径比对梯度材料热应力的影响规律,并从热物理参数角度讨论该影响规律。
4. 建立热物性参数差距更大的 W/Cu 梯度材料物理模型,考虑到消除几何尺寸的影响,建立圆盘状几何模型,对梯度层厚度、梯度层体积分数、梯度层组成相长径比三个影响因素进行正交设计。
5. 对三个影响因素的显著性进行准确的数量估计,分析影响因素的主次关系。
6. 综合以上分析,总结梯度材料设计原则。

第二章 组成相形态对梯度材料热应力的影响

目前以缓和热应力为目的的梯度材料优化设计主要集中在宏观方面,如梯度分布指数、梯度层层数、梯度层厚度等,而对于微观方面如梯度层组成相的形态、大小等研究较少。事实上,宏观因素对梯度材料热应力的影响归根结底是通过影响梯度层的热物理性能参数起作用。而微观因素同样直接影响着梯度层的热物理性能参数,其影响作用必然不容忽视。

本章将通过有限元方法研究梯度层组成相形态对梯度材料热应力的影响。首先建立梯度材料的物理模型、设定计算的边界条件并进行计算;然后从热物理性能参数的角度对计算结果进行讨论、分析组成相形态的影响规律。

2.1 物理模型建立及边界条件

2.1.1 基本假设

本章设定梯度材料的组织和热物理性质为各向同性;梯度材料的降温过程为稳态过程。在建模中为了节省计算资源,有效的节省计算时间,故采用的材料尺寸相对较小。采用本模型同样可以计算大尺寸模型的热应力问题。

2.1.2 几何模型的简化

为了分析组成相形态对梯度复合材料热应力的影响及其热应力缓和效果,先采用长径比 l/d 表征组成相的形态,选取长径比 l/d 分别为 1、3、5、7、9、11、13、15、17、20、30 的 11 种组成形态,建立了 11 个由组成相 R 及基体 M 两相组成的 R/M 梯度复合材料模型,各模型梯度层的组成相长径比相同的,方向平行于 X 轴。梯度复合材料模型的几何尺寸如下:长(X轴) 100 mm,宽(Y轴) 20 mm,厚(Z轴) 15 mm,模型在 Z 方向上均匀分为 6 层,沿 Z 轴正方向分别为纯基体材料 M 层,层内组成相 R 体积分数分别为 20%、40%、60%、80%的梯度层和纯组成相材料 R 层,梯度模型的几何模型及梯度层内单向组成相的形态如图 10 和图 11 所示。同时建立了由纯组成相材料 R 和纯基体材料 M 两种材料直接连接的非梯度材料模型作为对比试验,非梯度模型 R、M 两层厚度均为 7.5 mm。然后采用有限元软件 ANSYS 对梯度材料和 R/M 两种材料直接连接的非梯度材料的热应力进行数值模拟。

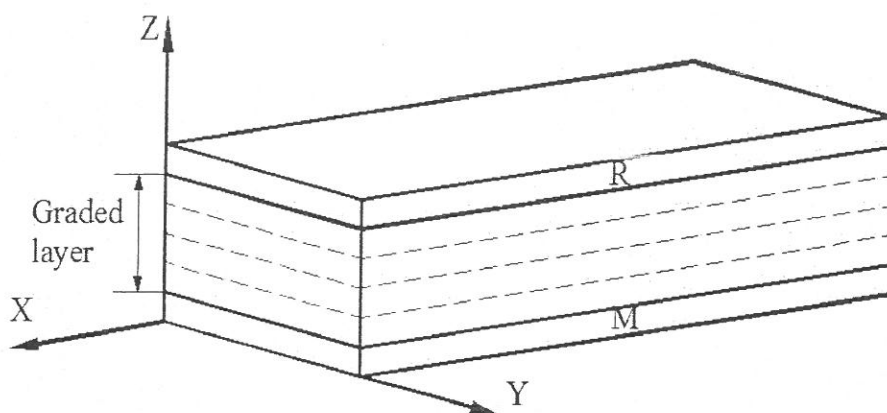


图 10 梯度复合材料几何模型

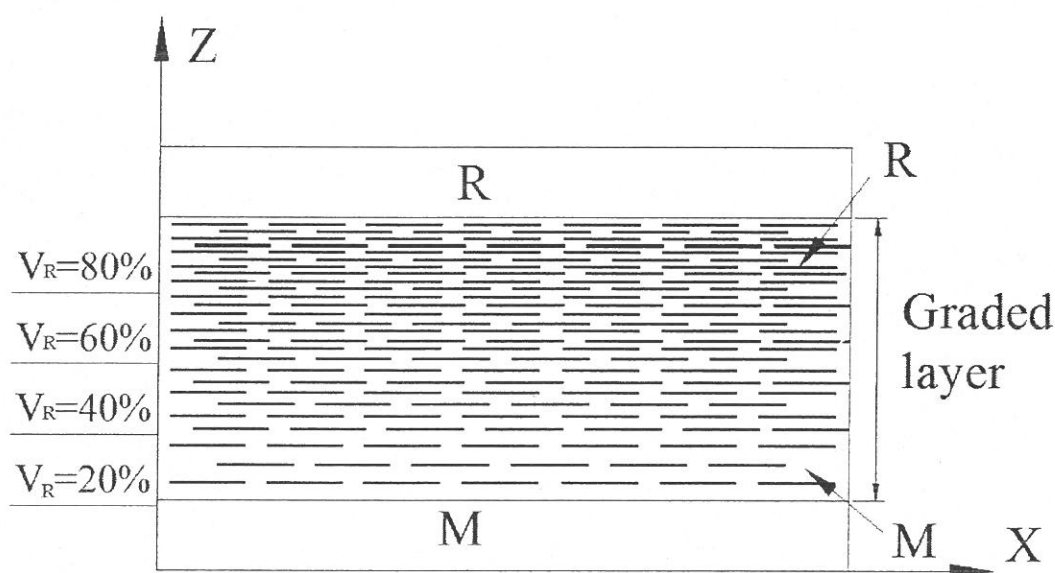


图 11 梯度材料纵截面示意图

2.1.3 有限元建模设计

常规的有限元计算模型的建立一般有三步：首先设定单元类型并输入单元参数；其次建立有限元分析的几何模型；最后进行网格划分并赋予单元类型。对于梯度材料的三维稳态热应力问题，选取 SOLID5 热-结构耦合单元进行求解。经初步均匀网格划分计算发现，层界面及侧棱处应力较高，因此为准确反映层界面和侧棱处应力分布，需要在两处采用较细密的网格划分，图 12 为横截面（YOZ）经网格划分后示意图。

梯度材料由于成分的不均匀分布，其有限元模型的建立相对较复杂。从整体上看，梯度材料的几何模型是整体块体，但是其个梯度层的物性参数又各不相同。

一般有限元建模方式有两种：一种是自顶向下的直接建立块体整体的方式；一种是从点线面到整体的建模方式。采用常规的建模方式，如果采用自顶向下的建模方法，直接建立整体块体，则无法对各层材料进行不同的单元特性赋予；如果自底向上的方法，先建立 6 层材料层，再进行网格划分并赋予单元特性，则会因为单元特性的差异而不能粘结成一个整体。

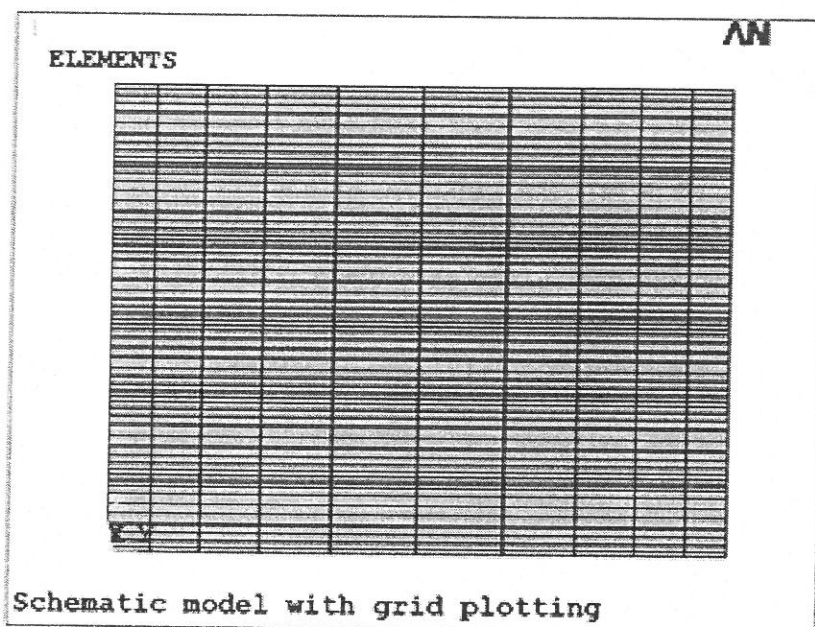


图 12 梯度材料模型端面网格划分

为了避免以上两个问题，本文采用自底向上的建模方法，首先建立端面模型并进行横截面的网格划分，如图 12 所示；其次分别对每个材料层所对应的面使用单元进行拉伸，在拉伸的同时赋予每一层不同的单元特性，如图 13 所示；最后进行元素合并、压缩。这种建模方式把几何模型的建立和网格的划分同时进行，避免了模型的粘结过程，从而实现了整体建模。建模和计算条件设定过程的完整程序的命令流参见附录，建模过程的具体步骤如下：

- 1) 选择计算单元为 SOLID5；
- 2) 输入各层材料的热物性参数；
- 3) 建立各层材料的 6 个端面，由于这 6 个面不平行于 XOY 平面，采用 mesh200 网格划分工具对其进行网格划分（图 12）；
- 4) 使用 SOLID5 单元和各层材料单元参数对 6 个面分别进行单元拉伸（图 13）；
- 5) 清除端面网格，并对重合元素进行压缩、合并。

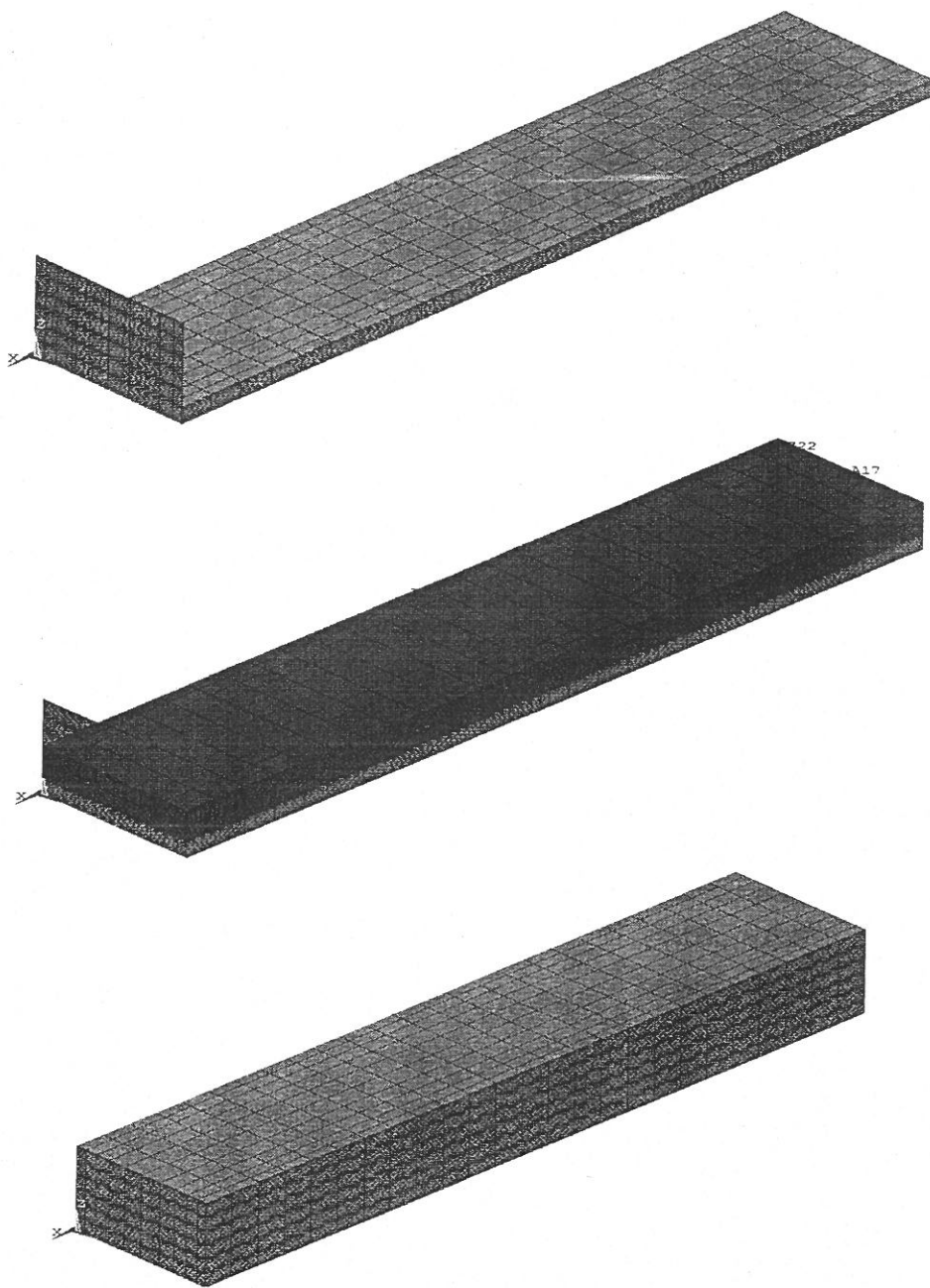


图 13 有限元建模单元拉伸过程

2.1.4 热物性参数模拟及边界条件设定

材料的稳态热应力计算是热-结构耦合场问题，该问题的数值模拟需要输入材料的弹性模量 E 、线膨胀系数 α 、导热系数 k 、密度 ρ 、泊松比 μ 等参数，梯度材料的参数越接近于实际，计算结果越精确。梯度层的导热系数 k 、密度 ρ 、泊松比 μ 一般采用线性混合规则计算，线膨胀系数 α 采用更精确的改进后的复合材料混合法则^[50]计算，如式（7）所示。而对于弹性模量 E ，由于组成相长径比较小，相对于组成相长度，其端面与基体的端面效应不能忽视，因而采用简单的混

合法则^[51]计算梯度复合材料的弹性模量 E 将会产生较大的误差。而 Halpin-Tsai Equations^[52]考虑了组成相长度对弹性模量的影响, 其结果更为精确, 故采用 Halpin-Tsai Equations 计算梯度复合的纵向弹性模量 E_1 和横向弹性模量 E_2 , 如式 (8)、(9) 所示:

$$\alpha = \frac{\alpha_R E_R V_R + \alpha_M E_M V_M}{E_R V_R + E_M V_M} \quad (7)$$

$$E_1 = \frac{1 + (2l/d)\eta_1 V_R}{1 - \eta_1 V_R} E_m, \quad \eta_1 = \frac{E_R/E_m - 1}{E_R/E_m + 2l/d} \quad (8)$$

$$E_2 = \frac{1 + 2\eta_2 V_R}{1 - \eta_2 V_R} E_m, \quad \eta_2 = \frac{E_R/E_m - 1}{E_R/E_m + 2} \quad (9)$$

2.1.5 模拟用材料的选择及边界条件设定

Ti 是金属基复合材料最早使用的基体合金之一, 具有较小的弹性模量和较大的线膨胀系数, 高强度的 W 是特别有用的增强材料, 具有较大的弹性模量和较小的线膨胀系数。因此, 本文选用的组成相 R 和基体 M 的热物性参数数据为接近弹性模量和线膨胀系数差异均较大的 WAL-1 牌号 W 和 TA7 钛合金的热物性参数值, 这样既能更清晰反映长径比对热应力的分布的影响规律, 又具有一定的现实意义。表 1 为梯度材料 R/M 两组成相的物性参数值。由于 TA7 能在 500 °C 长期使用, 而 WAL-1 的使用温度远高于 500 °C, 因此设定计算条件为模型初始参考温度 500 °C, 置于空气中冷却至室温 25 °C, 空气对流系数为 110 W·m⁻¹·°C⁻¹。

表 1 模拟梯度材料 R、M 两组成相的一些常规性能^[53]

	E/GPa	$\alpha / ^\circ\text{C}^{-1}$	$k/(\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot^\circ\text{C}^{-1})$	$\rho/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	μ
R	350	4.50E-06	174	19300	0.28
M	100	8.00E-06	21.9	4510	0.31

2.2 计算结果及讨论

2.2.1 几何模型的形状影响作用

图 14 是梯度材料和直非梯度材料端面三轴向热应力示意图。由图 14 (a)、(b)、(d)、(e) 可见, 两种材料 X、Y 轴方向应力分布和大小均较相似, 在层

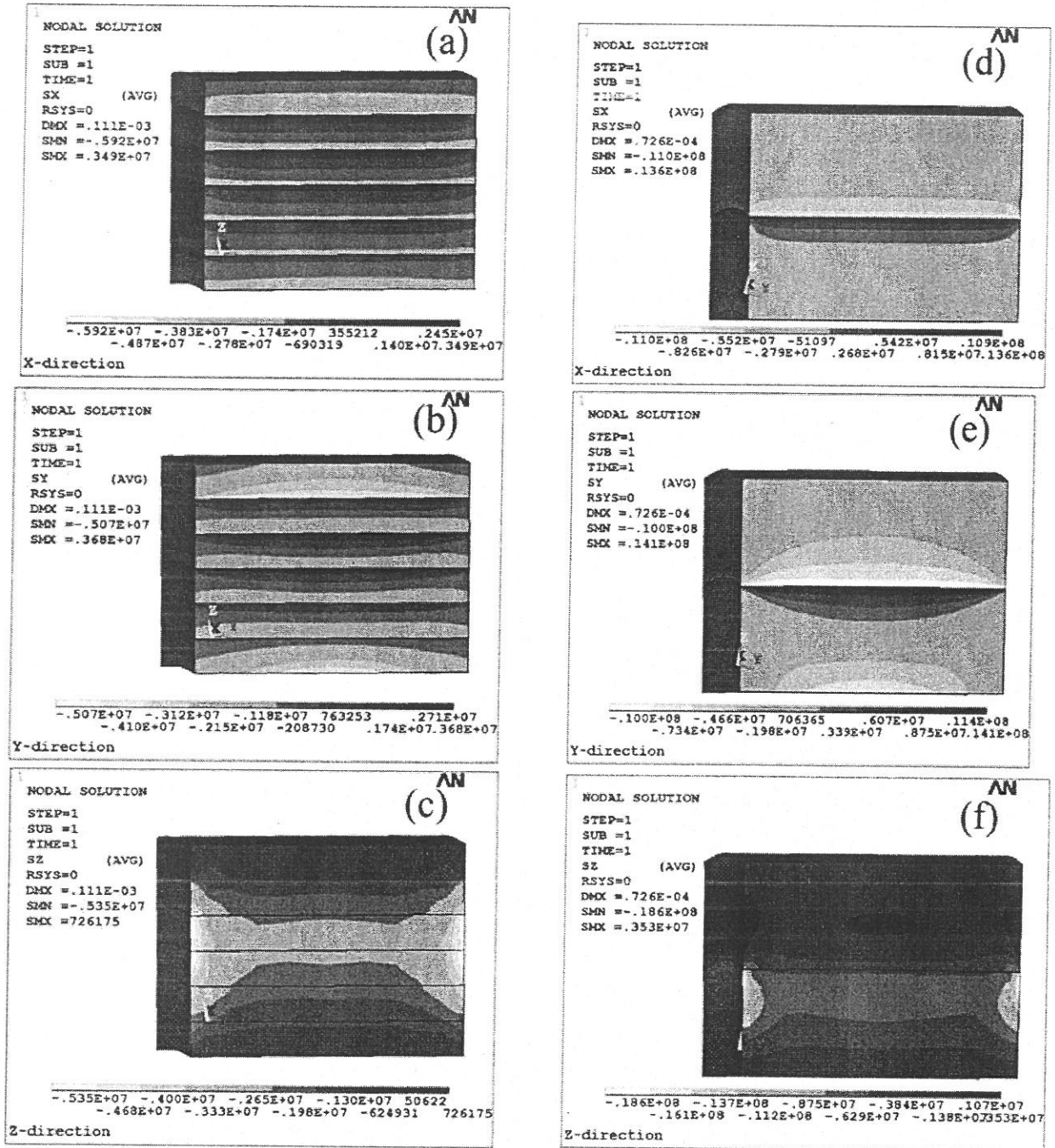


图 14 梯度材料和非梯度材料端面轴向热应力模拟结果:

(a)、(b)、(c)分别为梯度材料 X、Y、Z 轴残余热应力分布
 (d)、(e)、(f)分别为非梯度材料 X、Y、Z 轴残余热应力分布

界面处有明显的应力突变。由图 14 (c)、(f) 可知, 两种材料端面 Z 轴方向最大热应力均集中在侧棱位置, 且并无明显的应力突变; 非梯度材料中存在方向相反的热应力, 分别集中于 R 和 M 层; 而梯度材料中, 仅有沿 Z 轴负方向热应力, 集中于梯度层, 且最大热应力绝对值远小于非梯度材料。

图 15 是组成相不同长径比梯度材料三轴的最大热应力曲线, 可见, 平板型梯度材料具有明显的形状影响作用, 三轴向最大热应力以 X 轴热应力最大, Y 轴热应力最小。且其热应力变化规律虽然相同: 三轴向最大热应力均随组成相长径比 l/d 增大而增大并存在一个长径比临界值, 当 l/d 大于该值时, 最大热应力增加趋势减缓并逐渐趋于恒定, 但其变化大小差距很大, Z 轴最大热应力随长径比变化极为显著, 而 X 和 Y 轴最大热应力变化较小。

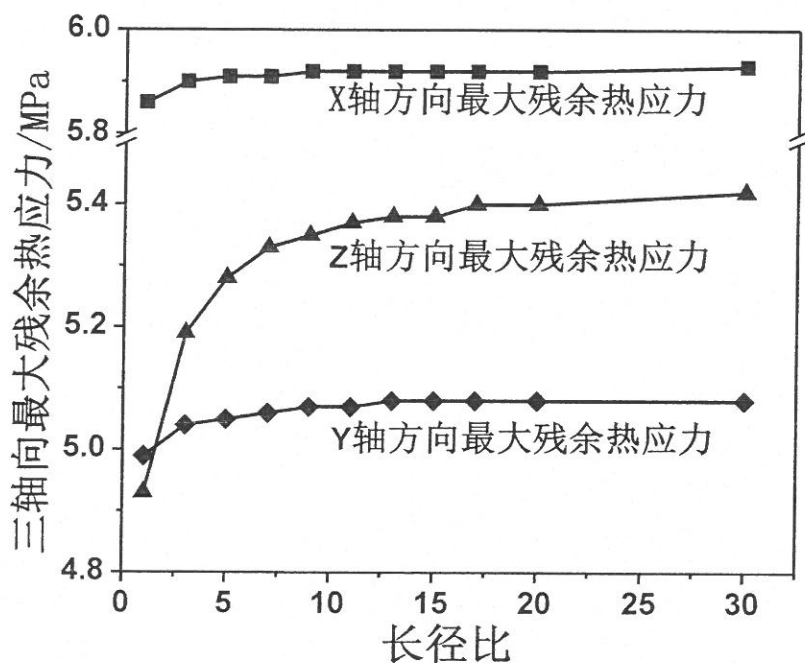


图 15 长径比对梯度材料三轴向最大热应力的影响

2.2.2 端面 (YOZ 面) 等效热应力的分布

热应力对工件的形状、尺寸和性能都有极为重要的影响, 但在一定条件下控制应力使之合理分布对提高工件的机械性能和使用寿命有着深远的实际意义。而最大 Mises 等效热应力点是材料最容易出现屈服的位置, 因而分析热应力的分布具有重要意义。经计算发现, 各模型端面 Mises 热应力分布云图如图 16 所示。可知, 各模型的 Mises 等效热应力的分布较相似, 梯度材料和非梯度材料在层界面处均具有较大的应力集中, 而各层界面侧棱处热应力最大。故对于不同组成相形态的热应力计算结果, 本章统一取该处中最大 Mises 等效热应力为衡量标准, 来分析长径比对热应力影响规律。

沿 Z 轴所在侧棱做出 Mises 等效热应力分布曲线, 如图 17 所示。可见, 相对于直接连接非梯度材料, 梯度材料梯度层界面处热应力显著减小, 热应力缓和

效果显著。梯度材料沿 Z 轴热应力呈“火焰状”分布，两侧纯材料层热应力较小，而中间梯度层热应力较大。材料的最大热应力分布在较之纯基体材料层强度较优的梯度层，对于材料的具体应用是相当有利的。图 17 中，梯度复合材料热应力在每层界面处均有应力突变，且突变值随厚度的增加即 V_R 的增大而增大，这使得 V_R 较大一侧热应力明显大于 V_R 较小一侧。

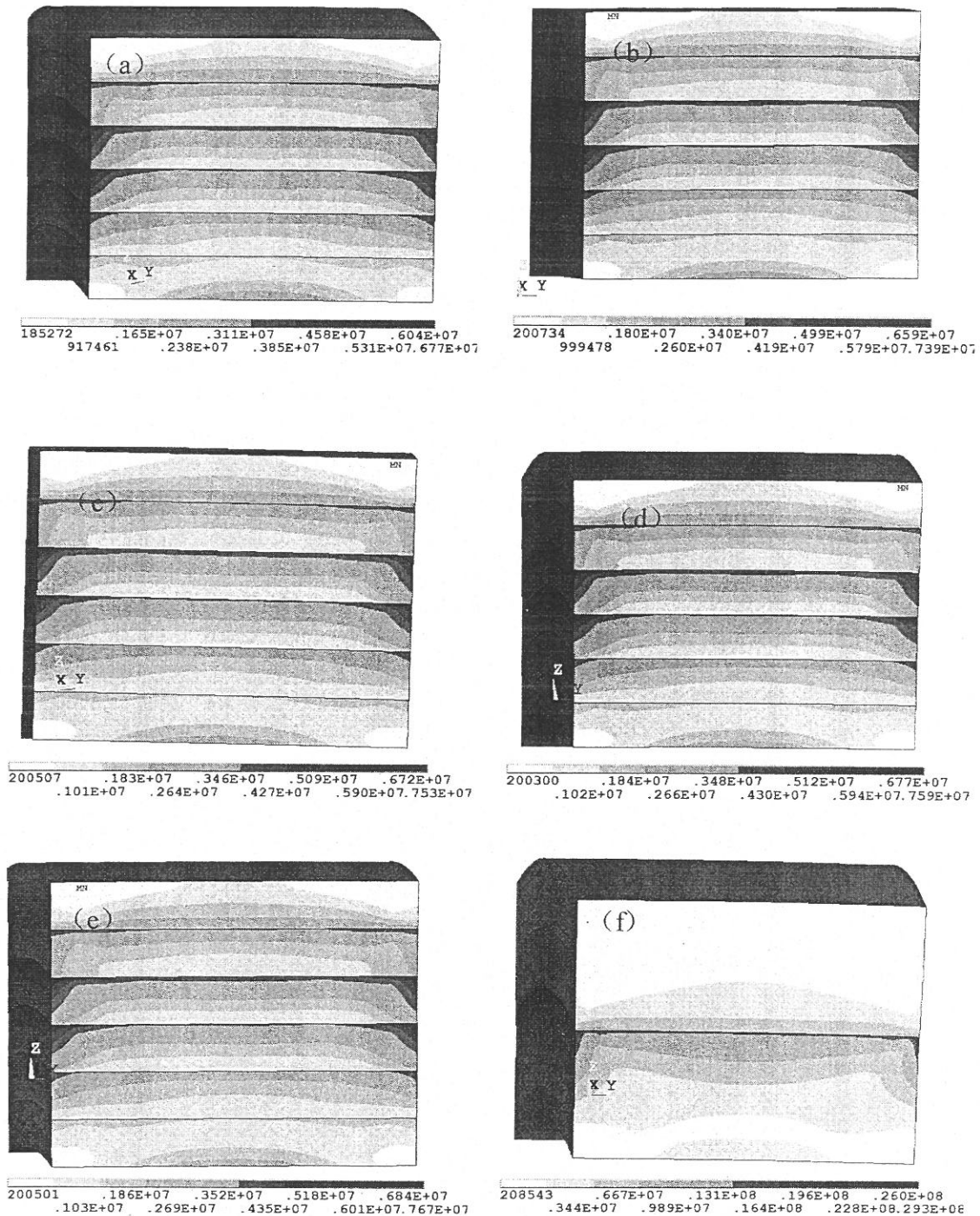


图 16 长径比不同的梯度材料和非梯度材料端面 Mises 应力模拟云图

(a) 长径比 $l/d=1$ (b) 长径比 $l/d=5$ (c) 长径比 $l/d=9$ (d) 长径比 $l/d=15$
(e) 长径比 $l/d=30$ (f) 直接连接非梯度材料

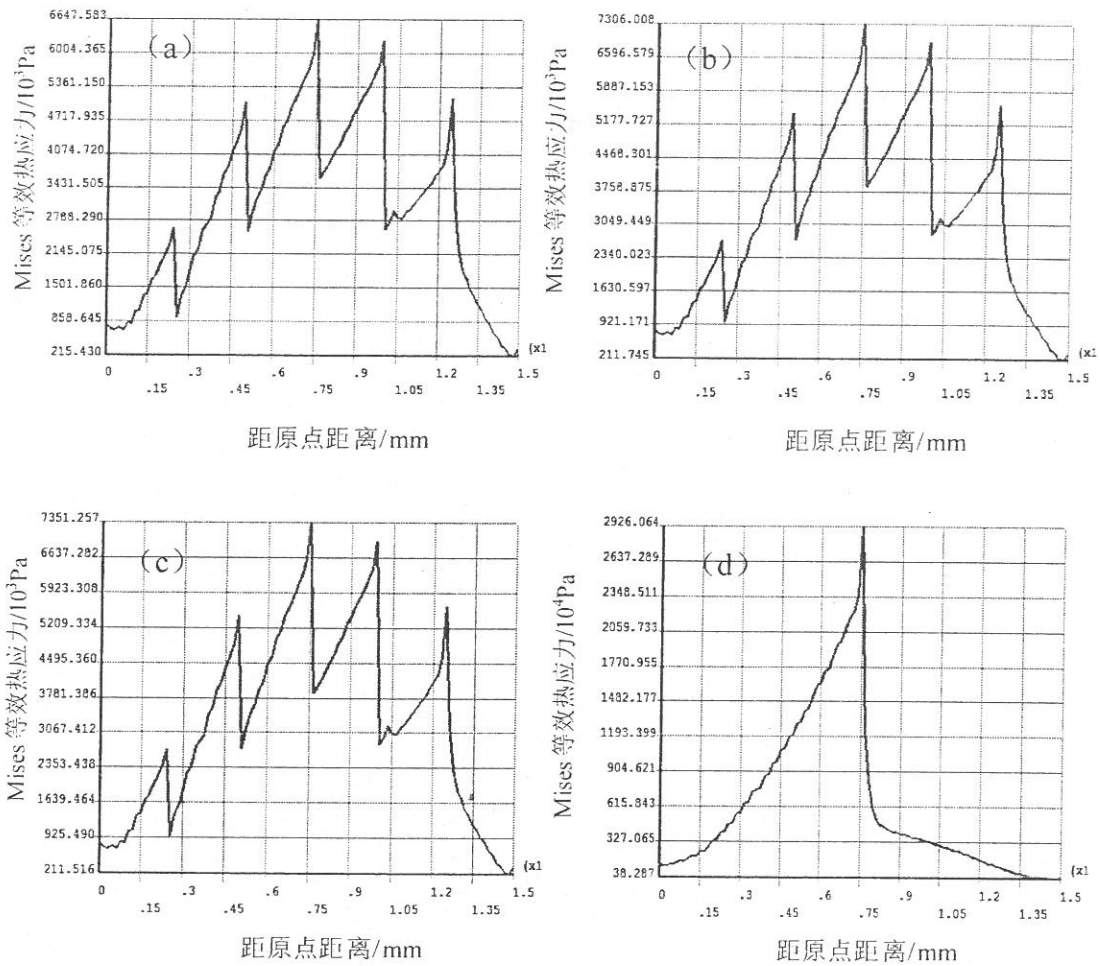


图 17 不同长径比梯度材料和非梯度材料的沿 Z 轴方向 Mises 热应力分布

(a) 长径比 $l/d=1$ (b) 长径比 $l/d=5$ (c) 长径比 $l/d=9$

(d) 直接连接非梯度材料

2.2.3 梯度材料的最大 Mises 等效热应力

不同的 l/d 必然引起梯度层热膨胀系数、弹性模量的变化，从而引起热应力的改变。图 18 是不同长径比组成相增强的梯度复合材料最大 Mises 等效热应力曲线，可见，最大 Mises 等效热应力均随组成相长径比 l/d 增大而增大，且当 l/d 大于 9 时，其增加趋势减缓并逐渐趋于恒定。这是由于 l/d 的增大，使弹性模量逐渐增大，而对热膨胀系数影响较小如式 (1)、(2) 所示，从而使热应力随之增大。而随 l/d 变化的弹性模量变化，又是非线性的，而是呈先增大后趋缓的趋势，因而造成了梯度材料最大 Mises 等效热应力出现如图 18 所示变化规律。显然，组成相形态对梯度复合材料的热应力具有明显的影响。当长径比较小时，组成相实际呈颗粒状，而当长径比逐渐增大时，组成相实际变为“短棒状”，甚至长纤

维状。有限元计算结果表明,颗粒状的组成相对于最大 Mises 等效热应力的缓和效果比长纤维状的组成相更好。

表 2 是选取梯度复合材料中 Mises 等效热应力最大的、组成相长径比 l/d 为 30 的梯度材料和直接连接非梯度材料最大 Mises 等效热应力的比较,可知,与直接连接非梯度材料相比,长径比 l/d 为 30 的梯度材料最大 Mises 等效热应力降低了 73.74%。这表明,梯度层的引入可显著缓和最大热应力。

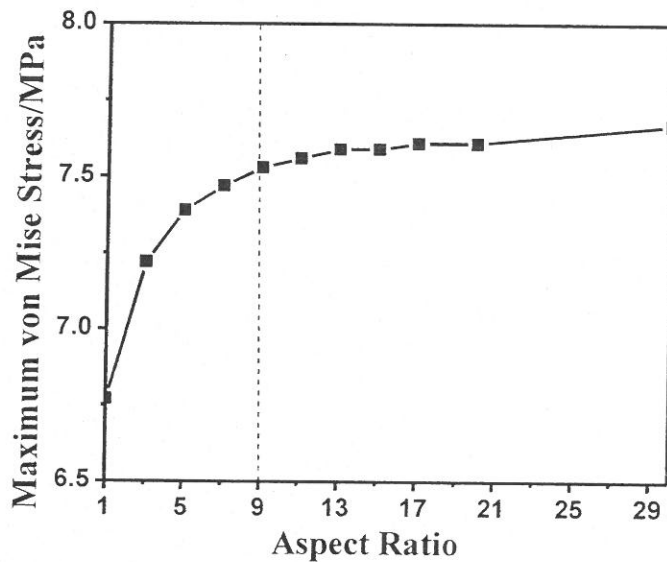


图 18 组成相长径比对梯度复合材料最大 Mises 等效热应力的影响

表 2 组成相长径比为 $l/d=30$ 梯度复合材料和直接连接非梯度材料最大 Mises 等效热应力比较

	Gradient composite/MPa	Non-graded material/MPa
von Mises stress	7.67	29.2

2.3 基于热物性参数的热应力分析

2.3.1 梯度层弹性模量差值 ΔE_I 对最大 Mises 等效热应力的影响

数值模拟结果中,最大 Mises 等效热应力随长径比 l/d 增大而增大,且当 l/d 大于 9 时,最大残余热应力增加趋势减缓并逐渐趋于恒定,如图 18 所示。残余热应力是由于温度变化时,梯度层间膨胀系数不同产生约束而产生的,其大小与梯度材料组成相的各种物理性能差异相关。各物性参数中,仅梯度层弹性模量 E_I 与长径比 l/d 相关。将式 (8) 整理可得:

$$E_1 = E_R V_R + E_M V_M - \frac{(E_R/E_M - 1)^2 V_R E_M}{(E_R/E_M - 1) + \left(\frac{2l}{d} + 1\right)/(1 - V_R)} \quad (10)。$$

其函数曲线如图 19 所示, 各梯度层 E_l 随 l/d 增大而增大, 当 l/d 大于一特定值时, E_l 增大趋势减缓且趋近于极值 $E_R V_R + E_M V_M$ 。但各层间 E_l 的增大速率却各不相同: 当 l/d 小于一特定值时 V_R 越大, E_l 增大速率越快; 当 l/d 大于该值时, E_l 增大趋势相近。其结果是, 随 l/d 增大, 梯度层间 ΔE_l 增大, 当 l/d 大于一特定值时, ΔE_l 趋于恒定, 这与热应力随 l/d 变化规律完全相同。可见, 弹性模量 ΔE_l 的变化是梯度材料最大残余热应力随长径比 l/d 的变化的重要原因。由式 (10) 可以预见, 若 E_R/E_M 越大, 即两材料的弹性模量差异越大, 长径比 l/d 对于最大残余热应力的影响越显著。

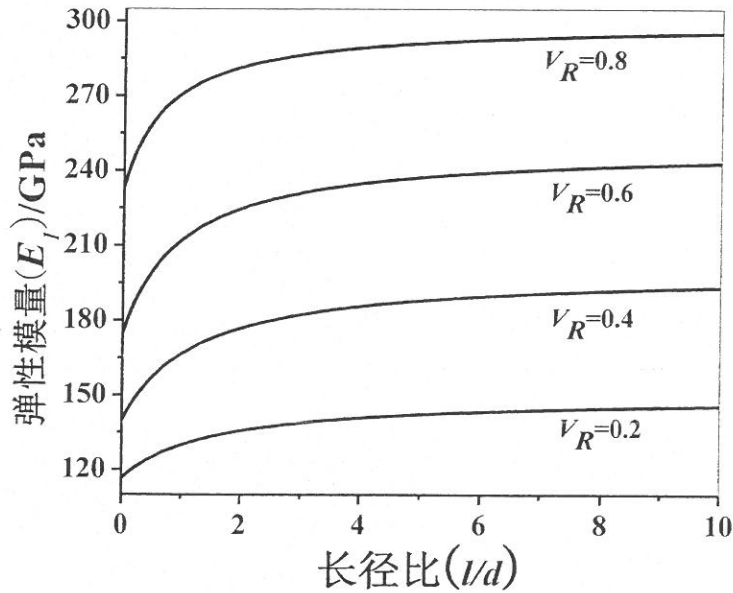
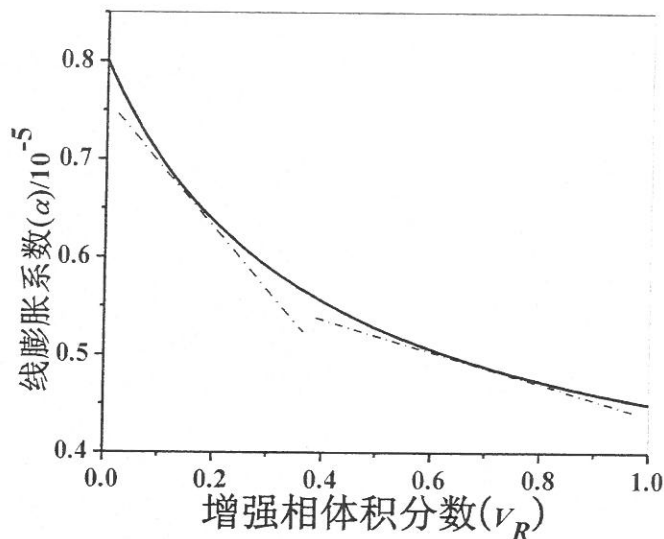


图 19 梯度层弹性模量随组成相长径比 l/d 的变化曲线

2.3.2 层间热膨胀系数差值 $\Delta\alpha$ 对热应力突变值的影响

模拟计算结果表明, X 轴方向层间热应力突变值随增强相 R 的体积分数 V_R 的减小而增大, 如图 20 所示。层间热应力突变是由相邻两层梯度层线膨胀系数 α 不匹配, 在冷却收缩时两层材料应变受阻所引起的。 α 随 V_R 变化的函数曲线如图 20 所示, 其斜率随 V_R 的减小而增大, 显然, 随 V_R 的减小相邻两层间 $\Delta\alpha$ 增大, 这也正是层间 X 轴热应力突变值的随 V_R 的减小而增大的重要原因。由此可以通过改变梯度材料梯度指数来控制相邻层间 $\Delta\alpha$, 从而控制热应力突变值的分布。

图 20 线膨胀系数 α 随增强相体积分数 V_R 的变化曲线

2.3.3 基于热物理参数的其他影响因素的分析

上述分析表明, 梯度层间弹性模量差值 ΔE_I 和线膨胀系数差值 $\Delta\alpha$ 是影响梯度材料热应力的重要原因。因此, 完全有必要从热物理参数的角度对其他热应力的影响因素进行分析。

对于梯度层层数对梯度材料热应力的影响, 文献[41-42]认为, 针对 W-Cu 梯度材料, 梯度层层数越多热应力越小, 且梯度层层数大于 4 时该缓和趋势减缓; 而文献[43]认为, 该缓和趋势临界梯度层层数为 6。从热物理参数的角度出发, 在梯度层厚度不变的条件下, 梯度层层数越多相邻层间 ΔE_I 、 $\Delta\alpha$ 越小, 而随着层数的增大 ΔE_I 、 $\Delta\alpha$ 的减小趋势必定会减缓, 其结果是, 梯度材料热应力随梯度层层数减小, 但其减小趋势会逐渐减小。而文献[41-42]、[43]所选取的梯度层成分分布指数 p 为分别 1.2 和 1, 造成了 ΔE_I 、 $\Delta\alpha$ 减小趋势的差异, 即热应力缓和趋势的临界梯度层层数有偏差。

对于梯度层成分分布指数 p 对梯度材料热应力的影响, 多数文献^[54-57]认为, 成分分布指数 p 约为 1-2 间时, 梯度材料最大热应力最小。从热物理参数的角度出发, 如图 19、图 20 所示, 随 V_R 的等差增加 ($p=1$), 各层间 ΔE_I 和 $\Delta\alpha$ 并不相等, 显然 ΔE_I 和 $\Delta\alpha$ 越均匀, 最大热应力越小; 而 p 又不能太大, 这是因为两种材料间热物理参数的差异是有限的。因而 p 略大于 1 时, 梯度材料最大热应力最小。

以上分析表明,梯度层层数和梯度分布指数两种影响因素对梯度材料热应力影响规律的实质是使梯度材料各层间弹性模量差值 ΔE_i 和线膨胀系数差值 $\Delta \alpha$ 减小并呈均匀分布。

2.4 小结

1) 几何模型对热应力有形状影响作用, X 轴热应力明显较大, Y 轴热应力最小。组成相形态对三轴热应力影响规律相同, 三轴热应力最大值均随长径比 l/d 增大而增大, 且大于一特定值时, 增大趋势减缓并趋于恒定。

2) 梯度材料各模型 Mises 等效热应力的分布较相似, 在层界面处均具有较大的应力集中, 且以各层界面侧棱处热应力最大。组成相形态对梯度材料 Mises 热应力有明显的影响, 最大 Mises 等效热应力随梯度层组成相长径比 l/d 的增大而增大, 当 l/d 大于一特定值时, 最大 Mises 等效热应力增大趋势减缓并逐渐趋于恒定。从热物理参数的角度分析表明, 弹性模量差值 ΔE_i 随长径比 l/d 的变化造成此规律重要原因。

3) 从热物理参数角度, 分析了梯度层层数和梯度层成分分布指数的影响规律, 发现两种影响规律的实质在于均匀减小材料层间弹性模量差值 ΔE_i 和线膨胀系数差值 $\Delta \alpha$ 。