

含非椭球颗粒复合材料的有效性能预报分析

付云伟¹, 倪新华², 刘协权³, 张 龙¹, 陈 诚⁴

(1. 军械工程学院 火炮工程系, 河北 石家庄 050003)

(2. 军械工程学院 车辆与电气工程系, 河北 石家庄 050003)

(3. 军械工程学院 基础部, 河北 石家庄 050003)

(4. 中国人民解放军 78638 部队, 四川 什邡 618419)

摘 要: 非椭球颗粒 Eshelby 张量不为常数, 没有解析解, 理论计算中通常将非椭球颗粒简化为椭球形进行分析。实际材料中颗粒并非都为规则的椭球形, 因此这种简化的合理性是有待讨论的。通过数值方法计算了几种特殊的非椭球颗粒的 Eshelby 张量和平均 Eshelby 张量, 与有限元结果对比验证了数值结果的准确性。在此基础上, 根据相互作用直推估计法分析了非椭球颗粒形状对有效性能的影响, 并分析了用椭球颗粒代替异形颗粒的可行性。结果显示, 数值方法计算的 Eshelby 精度较高, 将对称性较高的非椭球颗粒等效为椭球颗粒是可行的, 而片状颗粒对材料刚度影响更大, 将其简化为近似的扁平椭球进行计算时将带来更大的误差。

关键词: TiB₂ 陶瓷; 非椭球颗粒; 平均 Eshelby 张量; 有效弹性性能

中图分类号: TB332

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)04-1149-05

颗粒增强复合材料性能预测是复合材料细观力学研究的重要方面, 颗粒增强复合材料细观力学问题通常归结为夹杂物问题。1957 年 Eshelby^[1]证明了当夹杂形状为椭球时夹杂中应变均匀, 这一重要结论在解决颗粒增强复合材料问题中发挥了重要作用, 并基于此提出了多种有效性能计算方法, 如自洽理论、M-T 法、相互作用直推估计法等。到目前为止, 几乎所有的含颗粒材料性能估计都是将颗粒简化为椭球进行讨论的。

TiC-TiB₂ 陶瓷是一种新兴的高性能陶瓷, 并且有多种体系^[2-6], 其中 TiB₂ 多以扁平的六角棱柱形状存在。类似于 TiC-TiB₂ 复合陶瓷, 在实际材料中, 大多数颗粒具有尖锐的边缘和不规则的形状, 当颗粒不是椭球形状时, 即使是规则的多面体或多边形, 颗粒中的本征应变也不再均匀, 这是已经被严格证明了的^[7,8], 尤其在颗粒的尖角附近, 可能导致应力集中系数的巨大变化。

非椭球颗粒的问题已有较多的研究, 其中格林函数是应用最多的, 但是其中包含了非平凡积分, 因此一般无法获得解析解。Zou^[9]利用不可约分解法, 提出用边界积分法解决奇异积分问题, 得到了许多特殊形状颗粒 Eshelby 问题的解析解。Huang 等^[10,11]对弱非圆/球形颗粒的 Eshelby 张量也进行了研究, 得到了

弱非球形任意形状颗粒的 Eshelby 张量和平均张量, 并与椭球形状和有限元进行了对比, 对于含有类似形状颗粒增强复合材料相关问题的细观力学研究具有重要意义。对于多边形颗粒, 文献[12-15]等进行了深入研究, 并发现了正多边形颗粒 Eshelby 张量的一些新特性。Zou^[16]运用不可约分解, 二维条件下研究了异形颗粒等效为椭圆颗粒的平均 Eshelby 问题, 最大误差达到 65.78%, 指出, 不能随便将非椭球颗粒的平均 Eshelby 张量用近似形状的椭球的 Eshelby 张量代替。

本研究将非椭球颗粒/夹杂统称为异形颗粒/夹杂, 首先通过数值方法计算几种非椭球颗粒的 Eshelby 张量和平均 Eshelby 张量, 进而研究颗粒形状对材料有效性能造成的影响, 分析将非椭球颗粒理论抽象为椭球的准确性或误差, 并以含非椭球 TiB₂ 颗粒复合材料为例对材料有效弹性性能进行预报。

1 任意形状 Eshelby 张量及其有限元验证

无限区域 D 中局部区域 Ω 内产生均匀的非弹性应变 (本征应变) ε^* 时, 由于 Ω 外弹性基体的约束, 整个弹性体中应变 ε 与本征应变 ε^* 有如下关系:

$$\varepsilon = M \varepsilon^* \quad (1)$$

其中, M 即为 Eshelby 张量。与基体材料性能和颗粒

收稿日期: 2017-04-15

基金项目: 国家自然科学基金 (11272355)

作者简介: 付云伟, 男, 1986 年生, 博士生, 军械工程学院火炮工程系, 河北 石家庄 050003, E-mail: fywoec@163.com

形状有关, 根据经典力学静态格林函数, 任意位置 \mathbf{x} 处的 Eshelby 张量可以表示为

$$M_{ijmn}(\mathbf{x}) = F_{ijpq}(\mathbf{x})C_{pqkl} \quad (2)$$

其中, $F_{ijpq}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \int_{\partial\Omega^*} \left[\frac{\partial G_{ip}(\mathbf{y})}{\partial x_j} + \frac{\partial G_{jp}(\mathbf{y})}{\partial x_i} \right] m_q(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}')$, $G_{ip}(\mathbf{y})$

为静态格林函数, $\mathbf{y} = \mathbf{x} - \mathbf{x}'$, $m(\mathbf{x}')$ 为颗粒表面 \mathbf{x}' 处外法线方向, C_{pqkl} 为基体刚度张量, 三维条件下 $F_{ijpq}(\mathbf{x})$ 张量可以表示为 $J_{ik}(\mathbf{x})$ 和 $I_{ijkl}(\mathbf{x})$ 的形式^[7],

$$F_{ijpq}(\mathbf{x}) = \frac{(1-2\nu)(\delta_{ik}J_{jl} + \delta_{jk}J_{il}) - \delta_{ij}J_{kl} + 3I_{ijkl}}{16\mu(1-\nu)} \quad (3)$$

其中, $J_{ij}(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega^*} \frac{y_i y_j}{|\mathbf{y}|^3} m_j(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}')$, $I_{ijkl}(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega^*} \frac{y_i y_j y_k y_l}{|\mathbf{y}|^5} m_l(\mathbf{x}') dS(\mathbf{x}')$,

根据上式, 只要知道颗粒形状方程, 就可以求得对应的 Eshelby 张量。对于非椭球颗粒, Eshelby 张量没有解析解, 只能通过数值积分得到, 若颗粒表面的参数方程为

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(\theta, \varphi) \quad (4)$$

则外法线则为

$$\mathbf{m} = \left(\frac{\partial \mathbf{r}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right) / \left| \frac{\partial \mathbf{r}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right| \quad (5)$$

面积积分微元

$$dS = \sqrt{EG - F^2} d\theta d\varphi \quad (6)$$

其中, $E = \left(\frac{\partial r_1(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_2(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_3(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \right)^2$,

$$F = \frac{\partial r_1(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial r_1(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial r_2(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial r_2(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} + \frac{\partial r_3(\theta, \varphi)}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial r_3(\theta, \varphi)}{\partial \varphi}$$

$$G = \left(\frac{\partial r_1(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_2(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right)^2 + \left(\frac{\partial r_3(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} \right)^2$$

以双圆锥形颗粒为例, 颗粒形状和坐标系如图 1 所示。

锥面部分球坐标系下的参数方程为

$$\begin{cases} X_1 = R \sin \varphi \cos \theta \\ X_2 = R \sin \varphi \sin \theta \\ X_3 = R \cos \varphi \end{cases} \quad (7)$$

假设 a 为锥底圆形的半径, c_3, c_4 分别为锥面上部和下部的高度, 对于 x_3 正半轴部分,

$$R = \frac{c_3}{\cos \varphi + c_3 / a \sin \varphi} \quad (8)$$

x_3 负半轴部分,

$$R = \frac{c_4}{\cos \varphi - c_4 / a \sin \varphi} \quad (9)$$

假设无限大基体中双圆锥颗粒内产生均匀的非弹性应变, 在 MATLAB 中编写相关程序进行数值积分。颗粒中和颗粒附近的应力场与有限元结果对比如

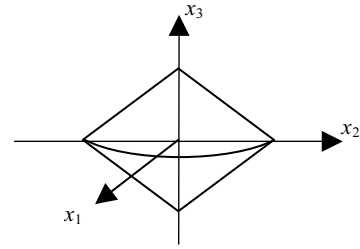


图 1 双圆锥形及其坐标系

Fig.1 Double-circular cone and its coordinate system

图 2 所示。图 2 通过有限元对比表明, 本研究计算的 Eshelby 张量具有较高精度。

2 含异形颗粒复合材料的有效刚度

上节分析容易看出, 颗粒为非椭球时, 颗粒中的应力场将发生较大变化, 尤其在尖角处, 应力集中明显, 对有效性能有一定影响, 直接将非椭球简化成椭球进行有效性能分析可能产生较大的误差, 下文将根据非椭球颗粒 Eshelby 张量数值结果对比分析实际误差。由于相互作用直推估法具有形式简洁、精度高的特点, 本文用此方法估计复合材料的有效性能, 分

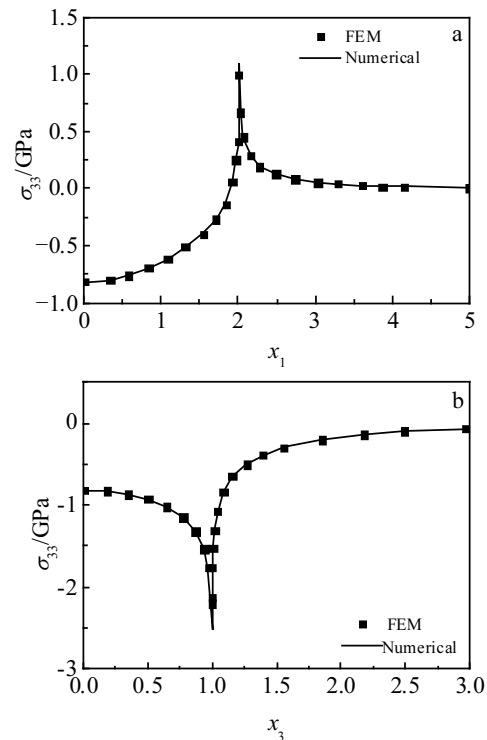


图 2 数值计算结果与有限元结果对比

Fig.2 Comparison of stress between the numerical result and the FEM result: (a) σ_{33} in axis 1 and (b) σ_{33} in axis 3

析颗粒形状对有效性能的影响规律。

相互作用直推估计法如下^[17]：刚度为 C_0 的基体中含有含量 f_i 刚度为 C_i 的颗粒时，这种含单一取向的颗粒的材料的有效刚度为

$$C_e = (S_0 + H)^{-1} \quad (10)$$

其中， $H = (I - \sum \Omega_i H_i^d)^{-1} H^d$ ， $H_i^d = \sum [f_i (H_i^{-1} + \Omega_i)^{-1}]$ ， $H^d = \sum H_i^d$ ， $\Omega_i = C_0 (I - \bar{M}_i)$ ， $H_i = S_i - S_0$ ，式中 i 表示第 i 种类型的颗粒，0 表示基体， Ω_i 为颗粒的本征刚度， H_i 为柔度增量， S_0 为基体柔度， I 为单位矩阵， C_i 和 S_i 分别为第 i 类颗粒刚度和柔度矩阵，且有 $S_i = C_i^{-1}$ ， f_i 为第 i 类颗粒的体积含量， \bar{M}_i 为第 i 类粒子的平均 Eshelby 张量，对于非椭球颗粒，可通过数值方法计算。

$$\bar{M}_{ijmn} = \frac{1}{Vol(\Omega)} \int_{\Omega} M_{ijmn} dV \quad (11)$$

其中， $Vol(\Omega)$ 为颗粒区域 Ω 的体积，对于像 TiB_2 这样的六角棱柱颗粒，数值积分比较困难，这里通过蒙特卡洛法 (Monte Carlo) 计算多重积分。对于椭球颗粒，Eshelby 张量为常数，平均 Eshelby 张量等于颗粒中任意位置的 Eshelby 张量，即

$$\bar{M} = M(0) \quad (12)$$

复合材料中颗粒在空间中随机分布，采用 Vogit 方法将上述刚度在空间体积平均^[18,19]，得到复合材料等效刚度为

$$C_e = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & & & \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & & & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & & & \\ & & & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} & & \\ & & & & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} & \\ & 0 & & & & \frac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{pmatrix} \quad (13)$$

材料弹性模量和泊松比则为

$$E = (C_{11} - C_{12}) \left(\frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \right) \quad (14)$$

$$v_0 = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (15)$$

其中，

$$C_{11} = \frac{1}{5} (C_{11}^e + C_{22}^e + C_{33}^e) + \frac{2}{15} (C_{12}^e + C_{13}^e + C_{23}^e) + \frac{4}{15} (C_{44}^e + C_{55}^e + C_{66}^e)$$

$$C_{12} = \frac{1}{15} (C_{11}^e + C_{22}^e + C_{33}^e) + \frac{4}{15} (C_{12}^e + C_{13}^e + C_{23}^e) - \frac{2}{15} (C_{44}^e + C_{55}^e + C_{66}^e)$$

3 几种形状非椭球颗粒的数值结果讨论

实际材料中，规则颗粒形状一般为球形、立方体、六角棱柱形、圆柱、多面锥以及其他无定形形状，本文针对几种典型形状进行讨论。假设一种材料中基体弹性模量为 $E_0 = 100$ GPa，泊松比为 $\nu_0 = 0.25$ ，颗粒弹性模量为基体 5 倍，泊松比与基体相同，颗粒含量为 50%，下面分别讨论几种异形颗粒对材料有效弹性模量的影响。同时，由于非椭球颗粒 Eshelby 张量计算复杂，如果能够用近似形状的椭球代替能够简化计算也有利于工程实践中作一般性估计，这里同时计算含有与异形颗粒近似的椭球颗粒复合材料的有效刚度，对比确定这种简化带来的误差。

3.1 球缺

球缺是指球形颗粒被消掉一部分，剩下的就称为球缺。球形颗粒是常见的一种颗粒，但是由于挤压或粉碎，球形颗粒通常不完整，球缺作为一种不完整球形颗粒具有一定的代表意义。假设球形半径为 a ，球缺平面到另一端顶点的距离为球缺的高度 h ，($0 \leq h \leq 2a$)，包含不同高度的球缺复合材料有效弹性模量如图所示，当 $h=2a$ 时即为完整球形。

图 3 中表明球缺缺面越大，材料有效弹性模量越高，无论是用扁平的椭球代替还是用完整的球形代替，都会有较大的误差。

3.2 六角棱柱

六角棱柱是常见的晶形，如规则生长的 TiB_2 。假设六角棱柱底面正六边形相对顶点距离为 $2a$ ，厚度 (高度) 为 $2h$ ，则厚径比为 $m=h/a$ ，不同径厚比的六角棱柱对弹性模量的影响如图 4 所示，其近似椭球用半轴为 (a, a, h) 的椭球代替。

图 4 中表明，对于六角棱柱形状的颗粒，厚径比越小，简化成椭球计算的误差越大，并且，厚径比接

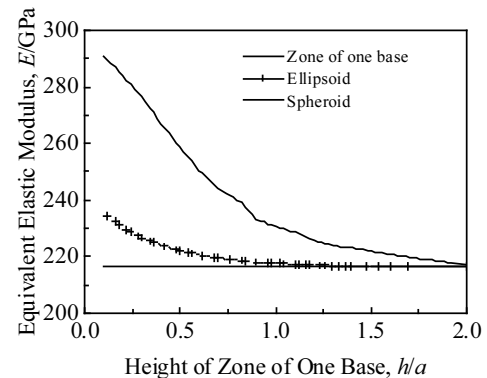


图 3 等效弹性模量随球缺高度变化规律

Fig.3 Equivalent elastic modulus varied with the height of the zone of one base

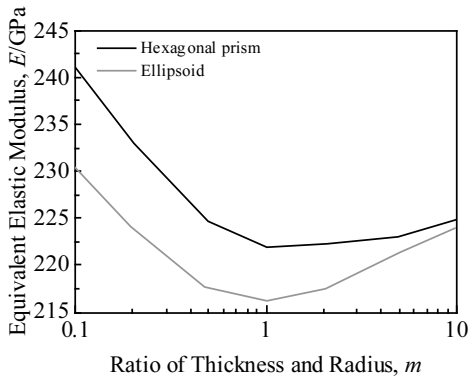


图 4 含六角棱柱颗粒和近似椭球材料弹性模量随厚径比变化规律

Fig.4 Variation of the equivalent elastic modulus with the ratio of thickness to radius of particles for the composite with hexagonal prismatic and similarly ellipsoidal particles

近 1 时对材料刚度的增强作用越小，这与椭球颗粒的效果是一致的。

3.3 超球

超球方程如下，

$$\left(\frac{x_1}{a_1}\right)^{\frac{2}{p_1}} + \left(\frac{x_2}{a_2}\right)^{\frac{2}{p_2}} + \left(\frac{x_3}{a_3}\right)^{\frac{2}{p_3}} \leq 1 \quad (16)$$

其参数方程为

$$\begin{cases} x_1 = a_1 (\sin \varphi \cos \theta)^{p_1} \\ x_2 = a_2 (\sin \varphi \sin \theta)^{p_2} \\ x_3 = a_3 (\cos \varphi)^{p_3} \end{cases} \quad (17)$$

其中 (a_1, a_2, a_3) 为超球的半轴，代表在空间各方向占据的尺度； (p_1, p_2, p_3) 为形状参数，代表表面的平滑程度。改变这 2 组参数能够形成不同的形状，如 $p_1 = p_2 = p_3 = 1$ 时为椭球， $p_1 = p_2 = p_3 = 2$ 时代表八面体， $p_1, p_2, p_3 \rightarrow 0$ 则接近于立方体。图 5 显示了 2 组参数变化时对材料有效弹性性能的影响。

通过对上面多种非椭球形状的分析发现，非椭球颗粒和椭球颗粒一样，都是在接近于球状即各轴近似相等时材料有效弹性常数最小，当颗粒接近于片状结构时，有效弹性常数更大，由于以上计算中颗粒刚度大于基体，因此可以推论，当颗粒刚度小于基体时，结论相反。可以总结为：非椭球颗粒和椭球颗粒一样，都是在接近于球状即各轴近似相等时对材料性能的影响最小，当颗粒接近于片状结构时，对材料性能影响更大。片状颗粒简化为椭球时误差更大，因此如果颗粒接近于片状应根据实际形状计算以减小误差。

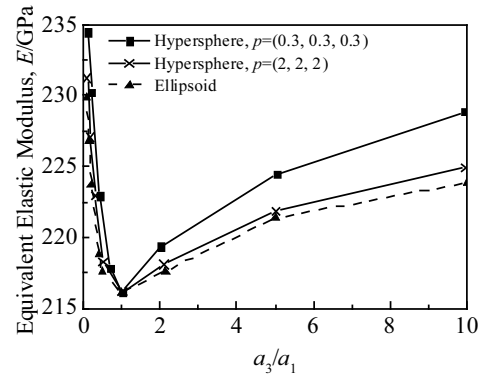


图 5 材料弹性性能随超球形颗粒形状的变化情况

Fig.5 Variation of the equivalent elastic modulus of composite with the shape of hypersphere particles

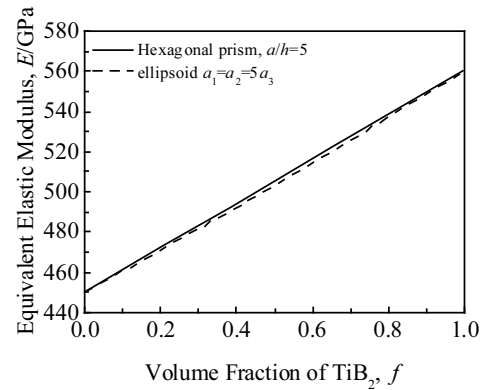


图 6 TiC-TiB₂ 复合陶瓷有效弹性模量随 TiB₂ 含量变化情况

Fig.6 Variation of equivalent elastic modulus of TiC-TiB₂ composite with the volume fraction of particles

4 TiB₂-TiC 陶瓷有效性能预报

对于 TiB₂-TiC 陶瓷，陶瓷中 TiB₂ 中大多数以正六角片晶或正六角棱柱形式存在，具有相对固定的形状， $E_{TiB_2} = 560 \text{ GPa}$ ， $E_{TiC} = 450 \text{ GPa}$ ，TiB₂ 含量变化时材料有效性能变化情况如图 6 所示。

由于颗粒在基体中随机分布，并且颗粒和基体弹性性能相差不大，因此，用近似厚径比的椭球代替进行计算完全能够接受。

5 结 论

1) 数值方法计算的 Eshelby 张量和平均 Eshelby 张量精度较高，能够满足精度要求。

2) 相同条件下形状近似的椭球和非椭球对比结果表明，非椭球颗粒对材料弹性性能更加明显。

3) 非椭球颗粒和椭球颗粒一样，都是在接近于球状即各轴近似相等时对材料性能的影响最小，当颗粒

接近于片状结构时, 对材料性能影响更大。片状颗粒简化为椭球时误差更大, 因此如果颗粒接近于片状应根据实际形状计算以减小误差。

4) 颗粒对称性较高并且不是扁平形状时, 或者基体与颗粒弹性性能差别不大时用近似椭球进行计算误差不大。

参考文献 References

- [1] Eshelby J D. *Proc Roy Soc A*[J], 1957, 241: 376
- [2] Wang H H, Sun S C, Wang D Y *et al. Powder Technology*[J], 2012, 217: 340
- [3] Zou B L, Xu J Y, Zhao S M *et al. Chemical Engineering Journal*[J], 2013, 233: 138
- [4] Zou B, Huang C Z, Song J P *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2012, 540: 235
- [5] Cui H Z, Ma L, Cao L L *et al. Trans Nonferrous Met Soc China*[J], 2014, 24(2): 346
- [6] Yang Y F, Jiang Q C. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*[J], 2013, 38: 137
- [7] Kang H, Milton G W. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*[J], 2008, 188(1): 93
- [8] Liu L P. *Proceedings of the Royal Society A*[J], 2008, 464(2091): 573
- [9] Zou W N, He Q C, Huang M J *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2010, 58(3): 346
- [10] Huang M J, Zou W N, Zheng Q S. *International Journal of Engineering Science*[J], 2009, 47(11-12): 1240
- [11] Huang M J, Wu P, Guan G Y *et al. Acta Mech*[J], 2011, 217(1-2): 17
- [12] Nozaki H, Taya M. *J Appl Mech*[J], 1997, 64(3): 495
- [13] Wang M Z, Xu B X. *Journal of Elasticity*[J], 2004, 77(1): 13
- [14] Kawashita M, Nozaki H. *Journal of Elasticity*[J], 2001, 64(1): 71
- [15] Xu B X, Wang M Z. *Acta Mech Sinica*[J], 2005, 21(3): 267
- [16] Zou W N. *Acta Mech Solida Sin*[J], 2001, 24(2): 176
- [17] Zheng Q S, Du D X. *J Mech Phys Solids*[J], 2001, 49(11): 2765
- [18] Jack D A, Smith D E. *Journal of Composite Materials*[J], 2008, 42(3): 277
- [19] Fu Yunwei(付云伟), Liu Xiequan(刘协权), Ni Xinhua(倪新华) *et al. Journal of Mechanical Engineering(机械工程学报)*[J], 2012, 48(16): 46

Prediction and Analysis of Equivalent Elastic Property for the Composite Ceramics with Non-ellipsoidal Particles

Fu Yunwei¹, Ni Xinhua², Liu Xiequan³, Zhang Long¹, Chen Cheng⁴

(1. Department of Artillery Engineering, Ordnance Engineering College, Shijiazhuang 050003, China)

(2. Department of Vehicle and Electric Engineering, Ordnance Engineering College, Shijiazhuang 050003, China)

(3. Department of Basic Courses, Ordnance Engineering College, Shijiazhuang 050003, China)

(4. 78638 Troops of PLA, Shifang 618419, China)

Abstract: Eshelby tensor is not a constant parameter and there is no analytical expression for a non-ellipsoidal particle. To simplify the calculation, a non-ellipsoidal particle was usually treated as ellipsoidal in most analyses, while the simplification needs to be vivificated for particles in composite are not always ellipsoid actually. To study the error of the simplification, the Eshelby tensor and the average Eshelby tensor of several non-ellipsoidal particles was calculated numerically, and the numerical results were verified by comparing to the finite element method results. Based on the numerical result of Eshelby tensor, the influence of the non-ellipsoidal on equivalent elastic property of the composite was analyzed, and the necessary condition of the simplifying the non-ellipsoidal particle to ellipsoidal particle was obtained. The results indicate that the numerical method in Eshelby tensor calculation is highly precise. It is acceptable to simplify the non-ellipsoidal particle to ellipsoidal particle when the non-ellipsoidal particle is highly symmetrical. The oblate particle has more important influence on the equivalent elastic property of the composite than the particles of other shapes; hence it causes larger errors to simplify the oblate particle into an ellipsoidal particle than simplifying the particles of other shapes.

Key words: TiB₂ ceramic; non-ellipsoidal particle; average Eshelby tensor; equivalent elastic property

Corresponding author: Ni Xinhua, Ph. D., Professor, Department of Vehicle and Electric Engineering, Ordnance Engineering College, Shijiazhuang 050003, P. R. China, E-mail: jxxynxh@163.com