

在材料研制中的连续介质细观力学 有限元建模现状评论*

Leon L Mishnaevsky Jr Siegfried Schmauder

Staatliche Materialprüfungsanstalt (MPA), University of Stuttgart, 70569 Stuttgart, Germany

E-mail: impgmish@mpa.uni-stuttgart.de

摘 要 评述了机械载荷下材料力学行为有限元模拟的先进技术. 分析了考虑材料微观及细观结构情况下, 对材料变形、损伤、断裂进行模拟时各种方法的优缺点及发展前景. 阐述了对材料行为模拟方法的发展, 包括基本的及先进的方法, 如体胞方法、真实结构模拟、粘结区模型等. 分析了在先进新材料的开发中运用有限元方法的可能性.

关键词 细观力学, 有限元法, 数值模型, 材料力学行为

1 前 言

具有优越性能(如高韧性、高强度、抗疲劳、耐磨损等)的新材料的发展对工业进步起着重要作用. 然而材料设计的成功往往与新的物理效应的发现是分不开的, 如硬合金中增加可以提高材料抗压强度的 WC 颗粒, 或 AlSi 合金的球状结构^[1,2]. 这样的发现大多数是经过实验反复摸索获得的. 在过去 30 年间, 出现了材料优化的另一个方向^[3]. 几句话可以很好的概括这个方向: 现今, 大多数物理效应(如无损伤材料中裂纹的生长; 无裂纹材料中损伤演化; 变形的界面效应; 界面断裂; 均匀材料的变形)已得到了很好的研究, 或多或少都利用了先进的方法来模拟(如断裂力学, 损伤力学, 塑性理论), 这些效应的共同作用成为材料发展与设计的关键因素.

在材料发展中体现这种相互效应的一个现实的例子是“陶瓷合成项目”, 这是由日本的几个大学和公司自 1994 年执行的项目^[4]. 这个项目的主要想法是利用最近提出的新概念“超组织结构控制”来制造一类新型陶瓷材料. 这种“超组织结构控制”包括在多尺度层次上, 同时控制不同的结构单元, 如形状、大小等, 来控制材料的特性. 这种情况下, 改进材料性能的物理机制并不是简单的一些唯象学模型所能代替的, 而要求利用数值方法来模拟受力状态下不同层次或不同效应间的相互作用.

特别的是, 真实材料的变形与断裂表现出极其复杂的过程, 包括多种效应的相互作用(如非均匀材料中不同相, 微观和宏观裂纹的同时形成与生长等). 近 30 年来模拟材料的数值方法获得了发展, 使材料的优化成为可能.

* Applied Mechanics Reviews 惠允翻译此文 (Published with Permission from Applied Mechanics Reviews, Volume 54, January 2001), 关键词是译者加的

本文对受载状态下多相材料的变形与断裂的不同数值模拟方法进行评述, 并对每一种方法的优点、发展前景、应用范围及利用这些方法进行材料优化的可能性进行讨论. 鉴于作者的研究兴趣是在强度、变形及工程断裂的有限元模拟方面, 且由于有限元方法是在细观层次上模拟材料行为的最普遍的方法, 本文只考虑了有限元模拟方面的工作. 细观力学方法, 如位错模型、非局部化塑性等, 在本文中并未考虑, 关于这些方法的分析可详见 Needleman^[5] 的工作.

2 材料的计算连续介质细观力学: 要点及基本方法

一般来讲, 描述材料行为的层次分为纳观 (原子水平)、微观 (位错、单位体积孔隙和夹杂)、细观 (材料微结构中比较大的部分, 如多个夹杂、薄层、梯度的组合体) 及宏观 (试样), 这种分类并不全面. 例如 Panin^[6] 建议了一种更细致的分类, 包括细观 I 和细观 II 层次 (此定义与结构单元变形的转动模式和众多结构单元的自相关转动有关).

Needleman^[5] 在对细观层次上变形模型评论的一文中, 定义细观尺度连续介质力学为“变形过程介于直接原子和非结构体的描述之间”, 在细观层次, 尺寸相关性是这一尺度水平上的特征. 事实上, Needleman 的细观尺度连续介质力学对应于 Panin 的细观 I 和 II 及上述分类中的细观及微观力学. 然而 Needleman 所考虑的主题是诸如离散位错塑性或非局部化塑性, 与非连续介质细观力学更相关. 在本文中, 由于其简单性而采用了上面的分类.

这样, 材料结构中细观层次定义为比结构中缺陷大 2~3 个数量级 (缺陷一般为 $10^{-9} \sim 10^{-5}$ m 范围) 且比试件小 1~3 个数量级的范围. 这种层次上的描述某些方面与控制材料性能相关联, 即宏观水平上性能的改善可通过变化具体的结构来实现, 而微观和细观层次上材料性能的改善可以通过热处理、粉碎金属冶金术等来完成.

作者建议使用一种广义的术语, 即材料计算细观力学, 表明数值方法的发展及使用方面的研究工作, 研究材料结构对其性能的影响及决定材料的优化结构, 本文正是如此. 材料微观力学, 这一术语经常用来描述材料力学行为的分析并考虑许多夹杂层次的结构, 对于我们来说, 似乎显得不够精确, 容易混淆. 因为它并未区分位错力学、孔洞、局部界面效应和相似的微观现象, 如沉淀硬化、局部剪切带、夹杂形态对强度的影响 (最简单的例子是高度填充硬合金的强度) 等. 因此, 细观力学定量描述了夹杂形态效应和直接影响材料强度和断裂阻力的基体塑性变形的效应, 而微观力学只是处理这些机制的形成、初始损伤及微观水平上的塑性流动. 计算细观力学试图形成一种必要的数值工具, 使其能够充分描述十分复杂的细观力学过程和相互作用, 并能作为材料设计的依据^[7]. 由于这种关系, 我们应该提到, 自从 Panin 等^[6] 引进“物理细观力学”作为他们研究的新领域后, 术语“细观力学”则包含了相对广泛的范围. Panin 等人的主要目的是对受载状态下细观层次材料的物理过程进行实验研究和理论分析作为材料发展的理论基础.

材料细观力学方法是建立在解决连续介质力学问题基础上的, 牵涉到本构方程及守恒定律. 解决的途径有有限元法 (FEM)、边界元法、有限差分法、有限体元法、离散元法等方法及对特殊问题适用的全域迦辽金 (Galekin) 型方法.

有限差分法 (FDM) 直接离散控制方程^[8,9]. 这种方法的优点是其简单性 (理解和实现两方面). 控制方程将整个区域离散成有限差分网格, 网格之间通过交接处节点联系, 对控制方程逐点近似, 对每一个节点都建立了有限差分方程. 利用 FDM 求得的结果是离散的, 即除了节点的解, 其余仍然是未知的, 而必需通过由节点的值和适当的加权函数进行插值求得. 由于 FDM 网格在大多数情况下是矩形的 (除了一些计算流体动力学的计算程序, 如 Flow3), 这种方法对于

复杂几何形状物体不是很有效。

与 FDM 不同 (用网格点阵代替区域), 有限元法将区域划分为许多互相联结的小单元^[10]。假设求解区域可以用一些单元的组合来模拟或近似, 有限元法可以获得控制方程的逐点近似。

在边界元方法 (BEM) 中, 边界 (与 FEM 中整个物体不同) 被离散成许多单元并求解边界上的解。边界元法对于只关心边界值而不关心内部点的问题是一种非常有效的数值方法。这种方法的主要优点是计算的高效率性 (由于 BEM 利用了相对于被求解区域的低维计算区域), 尤其是对于弹性问题。Brebbia^[11] 证明了有限元法通过插入广义 Galerkin 方法可以与边界元法在理论上建立联系, 这就为两种方法的混合求解提供了可能性, 即一些子区域可以利用 FEM 模拟, 而其它区域可以利用 BEM 来模拟。

离散元方法 (DEM) 的发展是为了模拟一些相对于问题本身的尺度, 存在比较大的非连续性的离散系统。这种方法中, 每一个不同的块体用单个单元来代替, 并允许发生有限位移、转动及不同单元之间的面接触^[12]。每一个离散元又可以逐渐离散成有限个单元, 这种方法叫混合有限离散单元法^[13]。利用这种方法既可研究多自由度问题, 也可以用来模拟连续或非连续材料的断裂行为。

虽然有很多方法可以模拟细观力学, 但解决细观力学问题的主要数值方法, 现在大多数情况下还是有限元法。这种方法几乎对任何连续介质力学问题都适用 (相对于 BEM, BEM 借助于经典公式, 优先利用于那些对边界值感兴趣的问题)。有限元方法的另一个优势是, 在将所有单元组合成整体模型之前, 就能求得单元的解, 这就意味着一个复杂问题被简化成一系列简单化的问题^[9,10]。

3 体胞模型 —— 从理想周期性到材料真实结构

由 Böhm 和 Rammer^[14] 一文可知, 复合材料微观力学领域的大多数工作都遵循两个基本模型思路中的其中一个。这两种思路是: 平均场分析 (致力于求解复合材料中每个组分中的平均应力和应变^[14]) 和周期性的微观场方法 (在周期性体胞单元组合的复合材料模型中, 求解微观应力和微观应变的分布^[19])。另外一个也应该列入其中的是材料真实结构的直接模拟, 此方法也被广泛应用^[3,15~18]。平均场分析使一些微观尺度效应得到平均 (除了增强相的体积分数、夹杂长径比及其排列的分布函数^[14,19])。这样, 仅两种方法, 即体胞模型和真实结构模拟, 能考虑真正复杂的材料微观结构。首先介绍体胞方法 (unit cell approach, UCA)。

体胞方法已经从二维模式发展到一个复杂的模式, 二维模式假设了各相及夹杂的大小分布相当特殊, 复杂模型可考虑一些相的真实分布, 用三维形式来模拟这种多相材料的行为。现今, 这种方法得到了进一步发展。横向受载的纤维增强复合材料 (FRC) 是数值模拟中考虑材料行为真实结构模拟的最简单的一种, 对这种情况人们可能认为解决的是一个二维问题。对纤维增强复合材料来说, 所有计算材料细观力学的经典方法, 包括对真实结构的模拟, 都已初步形成并得到验证。

在初始最简单的方法中, 材料的体胞模型 (unit cell model) 代表一个被基体包围的圆形纤维, 仅可以模拟那种严格周期性分布且大小相等的纤维增强复合材料的力学性质^[20]。在这种模型中, 关于材料结构的假设显然是不真实的, 如夹杂绝对规则的排列、忽略其它相及基体对所选胞元力学性能的影响等。然而, 正如下面所述, 这种方法似乎在分析夹杂的排列、体积分数及形状对整个复合材料的影响方面非常有效。

Brockenborough 等^[21] 利用体胞模型模拟不同形状的碳纤维周期排列 (方形、对角形或三角

形捆绑) 来研究纤维分布及横截面几何形状对硼纤维增强铝合金变形的影响 (应力 - 应变响应及应力分布). 对于随机分布的纤维, 他们利用含许多纤维的胞来模拟. 最终发现纤维分布对本构关系的影响比纤维形状对本构关系的影响强. 除了应用 ABAQUS 有限元程序外, 他们还利用了网格生成程序 QUADTREE.

1994 年, Shen 等^[22] 利用平面应变圆筒状、斜截圆筒状、锥体及球形增强相的胞研究了形状、集中度及颗粒分布对整个碳化硅 (SiC) 增强铝合金、铝铜合金及其它复合材料的弹性响应的影响. 最终发现增强相的形状严重影响复合材料的弹性响应, 作者给出了使复合材料获得最大及最小杨氏模量的夹杂形式. 1996 年 S ϕ vik^[23] 利用含弹性圆颗粒、弹塑性基体的轴对称胞, 并利用控制三轴应力的弹簧单元, 分析 AlMgSi 合金颗粒中应力与整个宏观平均应力之间的关系, 得到了连续介质层次与颗粒中局部应力之间的关系.

含损伤的胞 (如断开并脱黏的夹杂^[24~27] 或已损伤的基体^[18]) 给出了损伤材料的广义胞模型. 利用这样的胞方法, 可以研究材料结构的相互作用、初始损伤过程、夹杂微裂纹及孔洞的相互作用等对材料行为的影响, 在 5.2 节, 这个方面将作详细讨论.

含纤维中心偏离的修正胞模型可以应用于研究纤维非规则分布的复合材料^[14,19]. 1993 年, Böhm 和 Rammerstorfer 研究了纤维排列及簇集对应力场及复合材料初始损伤的影响. 利用了纤维中心偏离的方形胞模型, 他们计算了周期性分布、修正周期性分布及簇集周期性分布硼纤维增强铝合金的微观应力和应变场. 1993 年 Böhm 等^[19] 利用扰动周期性方形分布纤维的胞方法模拟了非规则排列的 Altex 纤维增强铝的行为, 利用含两个对称次胞元的参考体积模拟交错及非交错排列.

1998 年 Hönle^[28] 利用含不同形状 (方形、六角形、圆形等)、不同位置夹杂的弹性和弹塑性胞, 研究了钴夹杂的形状、位置及体积分数在 WC/Co 硬合金中对裂纹驱动力 (能量释放率) 和裂纹扩展的能量消耗的影响. 最终发现含尖角的钴夹杂及钴的高含量更易使裂纹扩展. 夹杂的形状、胞元中的位置及两个钴夹杂之间的距离对裂纹扩展而消耗的能量没有明显的影响.

镶嵌胞模型 (embeddeg cell model) 是 Dong 和 Schmauder^[20,29] 提出的, 可以避免初始胞模型中一些不真实的约束. 材料的镶嵌胞模型 (一根纤维由基体包围) 代表一个简单的胞元, 镶嵌于某个等效材料中. 等效材料的性质由自洽方式决定. 镶嵌胞模型可以包含材料其余部分的影响及其它夹杂与某一个夹杂相互作用的影响. 可以模拟更复杂结构的材料: 1997 年 Leβle 等^[30] 及 2000 年 Schmauder 等^[31] 提出了一种所谓的“基体模型”, 此模型利用胞元方法, 可以模拟一个包含两连续相的材料行为. Dong 和 Schmauder^[20,29] 于 1995 年及 1996 年利用镶嵌胞模型对横向受载的硼纤维增强的铝合金研究了纤维体积分数、基体应变硬化参数对极限流动应力和应力 - 应变关系的影响. 作者得到了方形或六角形排列的不同形状的镶嵌胞元中应力 - 应变关系曲线.

含多个夹杂的胞是胞方法的进一步发展^[21,32,33]. 在这个模型中, 假设了单个纤维的排列是不规则的, 而纤维束的排列是规则的. 这种胞方法相比于传统的胞模型, 可以更真实的模拟纤维的随机分布. Antretter 和 Fischer^[34] 利用了一个含两种不同夹杂的胞, 考虑不同类型的轴对称碳化物形状 (一般为椭球形、多边形、折线形等) 在不同边界条件下 (对称、周期性或反对称), 研究了在高含量碳化物条状结构的高速钢中, 碳化物的形状及排列对碳化物断裂机率的影响. 最终显示矩形或折线形夹杂比那些相对光滑、应力均匀分布的夹杂更易破裂^[34]. Weibull 模量 m 对碳化物的破坏机率影响相当大: 对于比较小的 m , 碳化物的大小是破坏的主要原因; 随着 m 的增大, 碳化物内部的应力更重要, 观察到相对于外载方向排列的相邻碳化物之间的影响比较大: 一个碳化物是否处于局部应力减小区, 还是处于受相邻碳化物影响的高应

力集中区, 碳化物破坏的可能性会完全发生变化。

1991年 Brockenborough 等^[21]利用含多个夹杂的胞研究了随机分布纤维增强复合材料。1995年 Axelsen 等^[32,33]应用胞模型研究了随机分布的纤维参数对复合材料力学特性及损伤行为的影响。在这些研究中, 都考虑了随机微观结构的特殊参数(如二阶强度函数、纤维的成对分布等)。他们利用由试样面积(大约200个不同类型的随机分布的纤维)和边界面积组成(和试样面积相互作用, 其尺寸由影响区计算来决定的)的方形胞研究了随机分布纤维参数对应力场和裂纹起始影响之间的关系。1995年 Axelsen^[32]给出了含单向长纤维玻璃复合材料中不同纤维分布所对应的局部应力场, 表明簇集纤维对于裂纹成核最敏感。

1993年 Siegmund 等^[35]利用一组理想化的大小相等的六边形组成胞来模拟含不同相邻相的二相合金的塑性流动。六角形代表随机分布的二相合金的晶粒。作者研究了相邻相对含粗结构二相材料塑性流动的影响。

在一些工作中, 胞模型与其它数值或分析方法结合起来模拟在一种尺度下规则而在其它尺度下无任何周期性的材料的行为。利用不同的方法模拟这种材料在不同尺度范围内的行为。Plankensteiner 等^[36,37]及 Böhm 等^[19], Böhm 和 Rammerstorfer^[14]以及这个组的其他成员提出了一种非常先进的等级模型, 其中胞方法仅在能观察到材料结构周期性的范围内使用, 而在其它尺度范围内, 利用分析的方法来描述材料的行为, 如层状材料、梯度材料。在考虑微观结构时, 这种方法更接近真实结构模型。为了研究含网状微观结构高速钢的整体响应及局部破坏机制, 他们利用了多尺度分级方法, 其中包括在微观尺度的显微图像分析、以统计平均为基础的细观尺度胞模型、置换场方法或 Mori-Tanaka 方法。作者研究了碳化物逐渐形核对应力-应变曲线的影响, 并显示碳化物晶粒形核是在微观尺度下的主要断裂形式。另一种方法是含有很多夹杂的六角形胞元, 被这些作者称为六角形砖状结构胞元(Hexagonal cell Tiling, HCT)。这种方法可以研究初始热残余应力对应力分布参数的影响。第一个数值模型通过 ABAQUS 实现, 第二个利用了 ABAQUS 有限元程序及 HEXGRAIN。为了研究含层状结构的高速钢中的整体响应、损伤机制、主应力和界面应力分布, 1998年 Plankensteiner 等^[37]利用所谓的微观-细观-宏观模型(micro-meso-macro model), 即每一个碳化物条带被处理成一个颗粒增强夹杂基复合材料(利用统计平均技术, 多相颗粒等效场方法)。在细观水平上, 高速钢(HSS)被模拟成多层复合材料。对于层状高速钢, HCT 概念是在微观水平上使用一个含大量夹杂的二维胞。在细观层次上, HSS 被模拟成复合梯度的金属基复合材料(MMC)。1998年 Hönle 等^[18]和 1999年 Mishnaevsky 等^[2,3]也报道了材料行为的两种层次的模型: 应力-应变曲线由胞模型而得, 然后传递给 Al/Si 合金有限元模型中每一个单元; 也可以模拟合金中损伤扩展。

初始胞模型的另一个方向是从二维到三维问题的过渡, 从纤维增强到颗粒增强复合材料的过渡。最简单的三维胞模型是含球形孔洞或夹杂的轴对称圆柱形胞。

1996年 Fang 等^[38]利用三维六角形和含球形、圆柱形、六面体和方向变化的长方体等颗粒形状的立方体胞模型来研究颗粒的形状、方向、体积分数对 Al_2O_3 颗粒增强铝合金的弹性模量和应力-应变曲线的影响。最终发现在给定方向上, 颗粒的长径比越大, 则这个方向增强效果越强。

圆柱形胞可以模拟三轴加载条件下材料的行为, 但并不包括任意比例的三轴应力情况。另外, 这种胞的组装并不能填满整个空间, 因此该方法隐含假设了一些孔洞(没有包括在模型公式中^[39])。于是发展了一种三维胞, 即棱形或立方体胞^[40], 消除了隐含孔洞假设, 因此可以更好地反映材料的真实行为。

1998年, Geni 和 Kikuchi^[41]以及 Kikuchi 和 Geni^[42]利用一个双层次的模型研究了形状、

体积比、颗粒间的相互作用以及空间分布对损伤形成及 Al/SiC 合金强度的影响。这种模型包含了含椭球形颗粒的轴对称胞模型及一个盒状超单元 (由包含不同颗粒体积分数和形状的许多胞组成)。对这种含不同颗粒长径比、体积分数、有无侧面约束、均匀和非均匀颗粒分布的合金, 作者得到了应力-应变关系。对于不同颗粒分布的基体中的初始损伤和脱黏也进行了研究。Geni 和 Kikuchi^[41] 提出的一种由许多单位轴对称胞组成的胞 (超级单元) 也可以考虑材料结构的非规则性和三维效应。

一种与上面提到的超单元方法类似的方法被 Imm 等^[43]1996 年用来比较二维平面应变与三维模拟的结果。作者比较了第一相和第二相随机分布的 $10 \times 10 \times 10$ 立方体和 10×10 正方形中应力应变分布, 最终显示二维给出的近似结果与三维的解很不相同。

从上面考虑和运用胞方法的结果看, 我们可以得出关于胞方法在以下几个方向发展的结论:

- 从简单、理想化的周期性到具有典型微观结构 (一般是真实的) 的材料: 从二维圆形纤维基体的胞到纤维偏离中心的胞, 到含一个夹杂的胞, 此夹杂代表基体内随机分布的不同的夹杂 (随机分布, 参见文献 [32,33])。二维圆形纤维胞可以研究填充物和基体的弹性常数、填充物的体积分数对复合材料力学性能的影响。这种胞只可应用于定量分析纤维增强复合材料的行或定性分析颗粒增强复合材料的行。其它的方向包括应用非轴对称胞代替了上面提到的纤维基体胞^[39,40], 应用由许多圆柱形胞组成的超级单元代替 Geni 等^[41,42] 应用的胞。这些方法可以作为从理想化到真实结构以及考虑三维效应时的一种过渡。最后一种方法可以模拟复合材料三维行。

- 等级模型 (hierarchical models) 看起来是通过相对简单的方法来描述复杂结构的一种非常有效的方法。当在一种可以观察到材料的周期性和规则性尺度层次时, 胞模型方法可与其它层次上的模型共同应用, 如层状材料^[19] 及超级单元法^[41]。胞单元方法最大的缺点是过分简单化: 这种方法要求高度的周期性和材料结构的规则性。事实上, 这样的材料是不存在的, 也不可能存在真正的均匀加载状态。然而胞模型可以 (大多数是定性的) 用来解决以下几种问题:

1. 研究各相的相互排列对复合材料力学性能的影响
2. 澄清初始损伤的机制
3. 研究孔洞形成的初始状态和孔洞生长。

这种方法的优点是计算量相对比较少, 可以在简单的计算中了解复杂的效果。这就是为什么很多人愿意用胞模型的复杂组合来研究复杂的微观结构, 而不用真实材料结构模拟的原因。

4 真实微观结构的模拟

颗粒增强复合材料不同于纤维增强复合材料。数值模拟钢和合金的最主要特点是: 这些材料的结构在三维状态下是自由随机的。这些材料的服役功能通常受几个结构层次上的材料结构所影响 (如基本的和次要的碳化物、高速钢中网状或层状结构), 而且仅在一个或两个这样的结构中才可能观察到一些规律性。这种材料可以用周期性微观场方法来模拟, 仅失去小部分关于结构的信息。胞模拟仅在如下几种情况下可行: 被考虑材料在结构中有一些周期性或规律性, 且这种规律性是决定材料服役功能的主要因素之一。如果影响性能的相或组分很大程度上是随机自由分布的, 那么必须研究材料的真实结构。典型的是这些材料的真实结构的计算机描述是通过材料的机械截面金相显微图像分析得到的^[2,3,37,44,45]; 这对于直接真实结构计算和材料结构的近似都是正确的^[19]。

1994 年 Hollister 和 Kikuchi^[46] 提出了基于图象的数据模型技术 (Digital Image-Base, DIB), 并研究了生物工程中骨头的微观结构图象效应有限元模拟. 利用 DIB 技术所得到的有限元模型可以直接解释复合材料的显微图象. Terada 和 Kikuchi^[47,48] 曾利用 DIB 方法和基于有限元的渐近平均方法模拟依赖于微观结构几何外形及组分性质的复合材料整体力学行为. 他们认为利用 DIB 得到的体胞模型的真实应力 - 应变曲线与理想体胞模型得到的不一样 (弹性响应偏柔, 应变硬化趋势不一样等).

最初, 模拟真实结构常集中于硬合金的行为上, 其次是钢. 这可能因为这些材料在工业上得到广泛应用以及他们的结构缺乏周期性的缘故.

我们看看一些模拟材料真实结构所做的工作. 1986 年 Ljungberg 等^[49] 利用显微图象得到了 WC-Co 硬合金的不同结构, 然后理想化结构使其相对应于有限元网格. 然后 Ljungberg 等人分析了裂纹前方塑性区的扩展为载荷的函数. 为了模拟晶粒与晶粒之间的界面, 作者利用了所谓的节点位错单元, 结果表明裂纹前方的塑性区尺寸远远大于黏结相中单个平均自由程. 1988 年 Fischmeister 等^[50] 利用有限元程序 ASKA 和镶嵌于均匀介质中的真实结构, 研究了 WC-Co 硬合金中裂纹前方黏结物的塑性变形, 发现裂纹从碳化物延伸到带中的那些点处, 由于孔洞聚集生长, 破坏了碳化物之间的联结带.

1995 年 Tack^[51] 利用有限元程序 FINEL 模拟了粗糙的两相材料 (如钢) 的变形. 在粗糙有限元网格中真实结构的一个单元镶嵌于均匀材料中. 硬夹杂附近的有限元网格被局部细化或加载区材料单元被细化. 研究了夹杂与基体力学性质的关系对局部应力集中, 及真实材料变形的影响.

1997 年 Telaar Reparaz 等^[16] 利用 ABQUAS 模拟了双联钢真实结构的变形, 利用 Verborde 和 Digit 有限元程序和显微图像的分析, 重现了材料真实结构. 有限元网格由方形单元自动与相应材料相联系. 作者得到了两相钢的应力 - 应变曲线并与组分中的应力 - 应变曲线进行了比较. 也研究了加载过程中的应力和应变的演化.

2000 年 Carter 等^[52] 提出了一种基于 C++ 目标定向的有限元软件 (object-oriented finite element analysis, OOF), 为了模拟材料真实微结构的热弹塑性变形, 此软件根据显微图象自动形成有限元网格的方法计算材料中应力和应变的分布.

Ghosh 和其合作者^[53~56] 提出了一个非常先进有效的方法模拟金属基复合材料 (MMCs) 的变形和初始损伤. 在模拟非连续增强的 MMCs 的初始损伤 (颗粒裂纹或断裂) 时, 他们利用了 Voronoi 体胞有限元模型 (VCFEM), 在这种方法中, 材料真实结构通过有限元网格的棋盘式布置来产生. 由这种棋盘式形成的每一个多边形至少包含一个夹杂并被当作一个有限单元.

将作细观范围分析的 VCFEM 及基于经典位移作宏观分析的 FEM 进行耦合, 他们发展了一种多尺度等级模型. 在这种分级模型框架中, 作者利用自适应方案及网格细划方法将被考虑的面积划分成含周期性和非周期性的微观结构小区域. 在周期性的微观结构区域中, 他们利用渐近均匀的方法; 在非周期性的微观结构区域中, 则利用 VCFEM 模型.

比较 VCFEM 等级方法和模拟真实结构的多相有限元 (MPE) 方法, 我们可以看出, 第一种方法精明而经济. 计算时间比较少且利用了微观结构的正规性提高模型计算的有效性. 另一方面, 真实结构模拟方法 MPE 不需要夹杂分布的任何规则性 (和 VCFEM 不同, 几乎不能用于分析任何含簇集的微观结构), 在一些方法中能简化三维情况, 并被用来模拟损伤演化和裂纹生长. 然而现有的三维 MPE 方法只可能模拟材料的变形、无损伤演化. 然而由 1999 年 Li 等^[56] 提出的三维 VCFEM, 可以模拟初始损伤.

1996 年 Iung 等^[43] 基于成熟的 FORTRAN 程序 (能自动生成二维有限元网格代替真实结

构图形), 分析了多相材料中应变不均匀性. 通过强加一个尺寸不断变化的方形网格于边界处, 通过不断的迭代方法而生成网格. 网格在两相界面处可自动细化.

1994 年 Broeckmann^[17] 研究了局部损伤和局部三轴应力对莱氏体铬钢真实结构中夹杂 (碳化物) 强度的影响. 利用有限元程序 CRACKAN 研究了夹杂分布对应力状态和这些钢的断裂的影响. 1996 年 Gross-Weege 等^[57,58] 研究了在不同热处理状态下的莱氏体钢中, 主裂纹前方的颗粒裂开、损伤演化. 作者考虑了当界面法向应力达到一个临界值时, 碳化物和基体之间的脱黏. 同时利用了一种胞模型研究了夹杂间的相互作用.

模拟真实结构普遍而明显的弱点是, 事实上每一个被考虑的微观结构都要求一种新的很复杂的有限元网格. 这就排除了模拟真实结构三维情况及模拟损伤和断裂的可能性.

多相有限元方法可作为模拟真实结构方法的进一步发展. 这种方法首先在 LARSTRAN 有限元程序中得以实现, 现在 ABAQUS 中也存在这种方法. 这种方法的主要特点是不同性质的相被作为单独的单元中的积分点. 与经典的有限元相反, 有限元网格在这种情况下, 不依赖于材料的相结构, 并能利用相对简单的有限元网格来模拟复杂微观结构中的变形. 在传统的单相单元中, 有限元网格边界必须与相边界一致, 在比较复杂或精细的微观结构中, 甚至简单三维情况下的微观结构中, 要实现这点有一定的困难.

利用任意简单结构的初始网格模拟复杂材料的行为是多相单元方法的主要优点. 使三维情况下相对简单的材料行为的模拟成为可能. 然而我们必须注意 MPE 几乎不可能精细地考虑界面的影响, 在一些情况下 (如 WC/Co 硬金属, 其中无真实的界面而是光滑过渡, 从纯 WC 通过与含不同聚集物的固溶到实际中纯钴的生成, 这种情况在一些界面中可以观察到), 这些限制甚至是有益的, 能更好地反映材料的性质. 在其中一相与另外一相不能相容的材料中, 界面呈现为一个真实的边界, 而 MPE 不能考虑界面效应, 体现出 MPE 的严重局限性.

在一些工作中多相单元方法得到了应用. 1995 年 Sautter^[59], Steinkopff 和 Sautter^[60] 利用了单相和多相有限元及 LARSTRAN 有限元程序模拟在 Ag-Ni 纤维及颗粒复合材料的大塑性变形, 利用单相单元模拟六边形胞, 而多相单元模拟真实结构. 作者还利用了重新划区技术. 这些技术是一种网格自适应过程, 类似于网格重新划分, 然而这种技术未改变网格的拓扑图 (与重新划分网格不一样). 仅允许位移被约束的节点靠近一相边界 (在一种多相材料中), 单元边界与相边界一致. 为了模拟塑性大变形, 作者利用了多次网格重新划分和 Akima 内插法, 最终得到在比较硬的相无规则空间分布情况下, 软相中应变局部化不再显著; 在横向变形过程中, 纤维转动是导致基体中塑性大变形的原因.

1995 年 Wulf^[15] 和 Lippmann 等^[61] 利用了 MPE 和单元消除技术 (见 5.2 节), 模拟了多相材料真实结构中裂纹产生和扩展 (Al-SiC 和 Al Si 合金). 1996 年 Lippmann 等^[61,62] 利用了 ANSYS (裂纹路径通过非线性弹簧单元预先确定) 和 LARSTRAN (利用多相有限元方法 (MPE) 和单元消除技术 (EET)) 又模拟了在高速钢中裂纹产生及分布. 材料的真实结构通过显微照片的图象分析而呈现, 并镶嵌于复合材料胞元中. 1995 年 Wulf^[15] 利用 Rice-Tracey 损伤参数和临界塑性应变作为单元消除的条件. Lippmann 等^[62] 利用 Rice-Tracey 损伤参数作为在基体和颗粒的临界最大应力时单元消除的条件, 数值模拟确定的裂纹路径非常近似地重现了实验中所观察到的裂纹路径.

1998 年 Soppa 等^[63,64] 模拟了真实微观结构 (Al/SiC 合金) 和含不同颗粒排列的人造微观结构 (随机的, 成带状分布簇集或在间隙中, 强带或弱带等), 最终结果显示带中颗粒越局部化, 剪切带中应力集中越强. 在 Wulf^[15], Lippmann 等^[61,62], Soppa 等^[63,64], Mishnaevsky Jr 等^[2,3] 工作中, 都利用了 LARSTRAN 有限元程序.

为了模拟在比较大的第二相晶粒之间存在第一相薄层的材料的行为, 1998年 Hönle^[28] 建议采用网格的细化技术. 这种技术允许调整单元尺寸到薄层的厚度, 避免了由于模拟网格密度较小而描述不好微观结构的情况. 这是通过将 PATRAN 发展的有限元网格转换到 ANSYS 有限元包 (允许网格的自动细分), 然后返回到 PATRAN 中, 所得到的. 利用 MPE 和单元消除技术, 1998年 Hönle^[28] 计算了 WC/Co 硬合金真实结构的裂纹阻尼曲线. 作为一种多相单元的功能梯度单元, 被 1996年 Rohde 等^[65] 和 1998年 Rohde^[66] 引进来模拟梯度材料的力学行为. 与多相单元相似, 材料性质被分配到各个高斯点, 没有必要涉及到整个单元, 通过在梯度区允许材料性质梯度变化的连续函数来实现.

最近模拟真实结构的一个结果是三维多相单元有限元的发展^[2,3,45]. MPE 的三维形式清楚地显示了真实结构和多相单元模拟的优越性. 材料结构的规则性在三维情况下几乎不可见 (仅对于一些特殊情况当球形夹杂在颗粒增强复合材料中不簇集), 这样就限制了体胞模型的应用. 有限元网格的构造, 单元边与相边界一致只有在一些特殊情况下才能发生, 因此三维 MPE 在考虑不均匀材料结构时, 可以模拟材料的行为. 有趣的是, 1993年 Poech 等^[67] 在其它方法几乎不可用的情况下, 预言“可以预言将来, 真实微观结构的有限元模型不得不保持二维”, 仅几年之后, MPE 就被发展起来了.

1997年 Lippmann 等^[45] 和 1999年 Mishnaevsky 等^[2,3] 模拟了 AISi 合金真实三维结构的变形. 为了重现材料的真实三维结构, 利用了材料的多个截面的显微图像分析. 结果证实了三维 MPE 的有效性和可行性.

1995年 Garboczi 和 Day^[68] 提出了在有限元模拟中另一种简化网格生成步的方法. 他们提出了一种算法来确定随机二相材料的有效线弹性性质. 这种算法将微观结构数字图象的每一个信息中心作为一个线性有限单元, 利用数字图象作为有限元网格, 可以简化有限元网格的生成. 作者数值分析了二相随机各向同性复合材料中等效泊松比, 并将结果与等效介质理论分析估计的结果进行了比较. 1995年 Bentz 等^[69] 和 2000年 Garboczi 等^[70] 利用“多层真实结构”等级方法研究了水泥和多孔介质的行为. 为了描述材料几个层次的结构, 他们提出了一套模型, 包括在纳观、微观和毫米水平上的数字图象结构模型. 在一个层次上模拟, 为下一个更高层次提供了输入数据. 如此这样, 将有限元模拟与基于自动的多孔模型结合起来.

1998年 Zohdi 和 Wriggers^[71] 提出了一个更有效的数值方法 (模拟微观结构). 这种方法包括以下几个步骤: 首先, 被考虑的区域被划分成几个子区域, 通过解正规化边界值问题得到近似局部边界条件. 子区域计算的必要性和子区域尺寸的调整由 Zohdi 和 Wriggers^[72,73] 提出的一种误差估计程序来验证. 假如子区域计算是合适的, 利用真实微观结构进行子区域的计算. 整个解由子区域的解组装而得. 子区域的解通过利用自适应有限元获得, 此有限元是专门为一般非规则微观结构设计的. 有限元网格自动适应来控制数值误差. 对每一个子区域的应力和应变场, 正规解通过初始假设值进行优化近似分析, 迭代获得. 算法的精度由每一步模拟的误差控制来保证. 真实结构模拟在一定程度上扩大了计算细观力学的可能性: 由体胞模型的定义可见其有限的适用性, 在他们适用范围之外的任何一步仅靠一些技术才可行 (如: 在真实材料中寻找越来越复杂的对称性来创造含多个夹杂的体胞或有许多基本的体胞来创造“超级单元”). 真实结构模拟使得没有规则性的局限情况下, 分析材料结构对其性能的影响成为可能.

然而, 对于真实结构模拟最明显的缺点是各自的经验主义: 一个人进行了材料真实结构的模拟, 则他可以得到结论: 被用的模型是正确的或不正确的, 被考虑的微结构保证高或低的韧性或强度等等. 然而这种模拟并不能给出对材料发展方向任何绝对的信息. 另一个明显的缺点是他们要求的计算量很大: 有些时候, 复杂结构的网格生成程序越来越短且越来越有效, 但对

结构的模拟计算却越来越长, 消耗时间越来越多. 为提高方法的有效性, 这就是真实结构模拟的优化算法成为一个具有前途的方法的原因.

总之, 真实结构的模拟为细观力学模型的实验给出了良好的基础, 可以应用到材料设计中.

5 细观力学的损伤和断裂

在非均匀材料中断裂过程一般包括几步: 整个物体内部随机位置处孔隙的形成, 微裂纹的形核, 生长、相互作用、群集、簇集、初始裂纹的形成、生长, 最后其中一个裂纹扩展至试样的破坏^[74]. 所有这些过程受材料中夹杂、孔隙的严重影响. 这样在细观及微观断裂力学中不得不考虑受载状态下, 材料中裂纹、孔隙、夹杂之间复杂的相互作用, 同时采用自适应有限元程序来处理材料中不断增长的非连续性. 大多数著名的模型仅考虑了这种问题的其中几个方面.

现在考虑一些模拟断裂的滋生和生长的方法, 作为研究材料微观结构对强度、断裂影响的基础.

一般地, 已经存在几种模拟材料中断裂的数值方法: 节点释放技术、黏结区概念、消除单元. 与寿命和临界载荷的计算不同, 微观及细观力学模拟的主要特点是, 不要考虑在处理程序之后的框架下的断裂 (也就是当一些裂纹生长或损伤分布参数已经从有效应力应变场计算中获得, 不再考虑裂纹进一步生长). 既然仅有这样的方法可以研究微观结构对断裂的影响, 微观模型需要分析应力场对裂纹的影响及裂纹对应力分布的影响. 数值模拟材料损伤和断裂的有限元方法, 为了克服在有限元框架下一个问题的准连续状态与裂纹生长的随机性和不连续特征的差异, 也需要一些特殊的解法.

5.1 初始损伤

体胞方法 (VCA) 经常被用来模拟材料中孔洞的产生及生长. 在这篇文章中, 这个方面作为单独一部分讨论, 因为微裂纹萌生的问题事实上更象介于材料变形模型 (在许多情况下利用体胞模型, 在大多数情况下, 利用更先进的体胞方法) 和断裂模拟 (没有任何结构周期性假设) 之间的一个过程.

考虑材料中初始损伤的一些模型:

1992 年 Bao^[75] 模拟了颗粒和界面脱黏中裂纹对复合材料强度和蠕变阻力的影响 (被 Al_2O_3 增强的铝、钛、镍合金). 他利用了一个三相损伤胞元模型 (六边形体胞含断裂颗粒、裂纹面垂直于应力方向, 胞元被转换成一个自由对情况) 镶嵌于一个没有颗粒损伤的复合材料中及这个模型的一个修正模型: 含圆柱形颗粒端部脱胶的损伤体胞模型中. 研究了整个颗粒体积分数、破坏颗粒的分数和基体硬化指数对应力应变关系的影响.

1991 年 Llorca 等^[76] 利用一个含不同形状的增强相 (如圆柱形、晶须和球形) 的轴对称圆柱形体胞, 研究了在基体中孔隙成核对 Al/SiC 复合材料变形的影响 (颗粒或晶须增强). 为了研究增强相簇集对复合材料的影响, 作者利用了含夹杂不同排列的体胞方法. 得到了不同增强相的 MMC 的总体应力 - 应变响应、孔隙体积分数、孔隙的分布及基体中应力和应变的分布. 最终显示提高塑性流动约束的因素易于降低基体破坏的最终应变.

1997 年 Walter 等^[77] 利用含纤维和包含有黏结单元的基体的轴对称体胞, 模拟了在 SiC 纤维增强硅酸铝钙中的初始损伤. 黏结单元代表在多个连续有限单元之间的一种表面单元, 可以发生破坏. 利用这种单元可以模拟材料的界面损伤. 作者发现导致纤维应力高度集中的强界面及基体的韧性对脱黏有重要影响.

1996 年 Eberle 和 Klingbeil^[75] 模拟了在弹塑性金属中球形孔洞的萌生及生长, 利用圆柱形

体胞和修正的 Riks 方法解决了不稳定性问题. 研究了双轴参数对材料弹塑性行为、局部应力、孔洞体积及临界水平的影响. 1996 年在球墨铸铁中, 利用圆柱形体胞, Brocks 等^[79] 考虑了三轴应力和孔洞形状对临界孔洞体积的影响. 这项工作中, 三轴参数由 $T = (\sigma_3 - 2\sigma_1)/3|\sigma_3 - \sigma_1|$ 来表征, 其中 $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ 是真正的主应力. 作者得到了等效应力与应变曲线及孔洞体积分数与应变的关系, 从胞元计算中给出了 Gurson-Tvergaard-Needleman 模型的参数.

在球墨铸铁中, 1996 年 Kuna 和 Zun^[40] 利用三维六方体和立方体胞, 研究了孔洞空间排列和三轴应力对损伤过程的影响. 作者发现孔洞的空间周期性排列对变形行为的影响比较弱, 但严重影响塑性破坏. 我们可以看出利用 UCA 方法可以解决以下的问题: 研究孔洞的形状、体积分数对材料行为的影响 (刚度减小), 模拟颗粒破坏、界面裂纹及其对材料刚度的影响. 1996 年 Sun 等^[80] 利用三维六方体胞和含币状裂纹的蠕变材料四氢化苯, 考虑了铁素体钢中微裂纹分布及其密度对固体蠕变本构关系的影响. 上面描述的所有有限元模拟都应用了 ABAQUS 有限元程序.

1996 年, 1997 年 Mozhev 和 Kozhevnikova^[26,27] 利用含球状刚性夹杂的圆柱形基体胞元的体胞模型和大变形方法研究了弹性基体、颗粒增强复合材料的力学行为. 当基体和填充物发生分离时, 分析了复合材料依赖于填充物含量的极限强度.

1993 年 Michel^[24] 利用含椭圆形, 断开或脱胶颗粒的轴对称胞, 研究了颗粒开裂和脱胶对 Al/SiC 复合材料的基体中孔洞生长的影响. 他得到了对于不同颗粒形状, 颗粒断开和脱胶情况下的应力-应变关系.

1993 年 Ellyin 等^[25] 考虑了双轴和多轴载荷对含 Al_2O_3 夹杂的铝基复合材料中损伤生长的影响. 利用了界面理想黏结和完全脱黏的胞及 ADINA 有限元程序, 他们发现界面层在双轴加载情况比单轴加载更容易损伤.

显然, 胞方法模拟孔洞的起始及扩展是基于一个很强的假设: 孔洞被假设为一定程度上均匀分布 (微裂纹非局部化), 且孔洞之间的相互作用非常弱. 这种局限性可以利用镶嵌胞来克服^[29]. 在这种情况下, 其它孔洞的影响可以通过边界条件和镶嵌的性质考虑进去.

5.2 损伤演化和裂纹扩展

孔洞相互独立生长以后, 损伤演化的下一步就是利用如此形成的裂纹处的局部应力集中来模拟^[81,82] 损伤的局部化和簇集, 然后就是裂纹的扩展.

一般地, 有两种数值方法来模拟断裂: 一种是裂纹被模拟成相邻单元间的不连续, 另一种是在整个单元中抹去裂纹^[83,84]. 两种方法各有其优缺点: 用不连续来代替裂纹, 导致了裂纹尖端处的奇异性, 并要求不断地调整自适应网格; 裂纹抹去模型不能排除在一些情况下裂纹张开比较大还有应力传递^[84]. 模拟断裂的有限元方法可以分成两个主要组别 (我们可以发现这些组与上面提到的裂纹的两种代替方法自然联系在一起). 一种方法主要是基于特殊类型的有限单元^[85,86]; 另一种方法是在裂纹可能扩展区, 假设特殊材料性质. 我们必须注意这两种方法是内在联系的: 软化某些区的模型作为后一组方法的基础, 在软化区内也要求一些特殊类型的单元. 第一组方法中, 我们提出移动单元技术^[87]、三角形或含一种内插函数的四边形单元, 保持了应力 $-1/2$ 奇异性. 这些单元位于裂纹前方作为裂纹生长的条件, 必须利用强度、断裂准则^[83] 或损伤参数 (如 G-T-N(Gurson-Tvergaard-Needleman) 模型在韧性材料中孔洞生长模型, 见文献^[88] 或 Krajcinovic 和 Fonseka 的脆性材料连续损伤模型, 见文献^[89]). 在裂纹扩展的模型中孔洞集结准则可以基于上面所提的孔洞生长模型.

考虑一些模拟材料断裂的方法.

在黏结区模型 (cohesive zone models, CZM) 中^[90], 裂纹路径预先假定, 作为一个材料薄层具有自己的本构关系 (表面力分离定理). 随着裂纹不断张开, 表面力达到最大值, 然后减小, 最后发生完全脱结, 则此本构关系消失. 在本构关系中, 软化部分 (表面从假定最大值减小到零) 影响解的正确性, 导致有限元解依赖于网格^[91]. 然而将所谓的长度尺度引进到公式中, 则消除解与单元尺寸的依赖性. 1998 年 Siegmund^[88] 研究了基于空洞生长聚集的裂纹生长模型 (利用 G-T-N 方法) 和黏结区模型之间的关系.

单元消除法 (element elimination technique, EET) 即当满足一些失效条件时消除有限单元 (对于所考虑的每一个材料定义). 利用这种方法, 模拟空隙或微裂纹的形成、生长和裂纹生长. 作为局部失效准则, 整体 (外载或位移) 和局部 (被定义了对一个给定单元, 例如, 塑性应变, Von-Mises 应力, 静水应力等) 值以及这些值的任何组合都被采用. 另外, 单元消除法对于多相和单相材料都可应用 (对于多相材料的每一相单元消除准则都应分别选择). 为了消除单元, 在这些单元中所有应力张量分量都被置为零. 结果是这个单元的所有力都变为零. 因此这个单元停止了在相邻非消除单元之间传递载荷的作用. 单元消除并不意味着一个被消除的单元真正从有限元网格中除去, 虽然它停止了与相邻单元的相互作用. 在解决问题中, 每一个单元消除后切线刚度矩阵必须更新. 这可以通过置消除单元的杨氏模量为零来实现. 为了避免局部平衡严重消失, 数值问题分几步来使应力等于零 (松弛步), 在被消除单元中, 杨氏模量在最后一个松弛步中等于零. 在 LARSTRAN 和 ABAQUS 有限元程序中也加入了单元消除法的功能.

比较单元消除法和黏结区模型, 我们注意到黏结区模型 (CZM) 的弱点是裂纹路径需要预先假设, 因此在 CZM 框架中, 不可能满意地描述裂纹倾斜及路径的变化^[17]. 利用同样的局部损伤准则, 可模拟微损伤及裂纹扩展则是 EET 的优点. 然而, 利用 CZM 比 EET 能更好地模拟界面断裂. 为了模拟沿界面的裂纹生长, 我们需要引进特殊单元或一个沿着界面的准接触表面 (黏结区, 黏结表面). 利用 MPE, 自动形成有限元 (FE) 网格几乎是不可能做到的.

在与 EET 相近的所有方法中, 1998 年 Wilsius 等^[92] 在裂纹前方单元第二个 Gauss 点, 张开应力达到最大值时, 将裂纹扩展模拟成材料的连续损伤.

由 Xia 和 Shih^[93,94] 及 Xia 等^[95] 提出的计算胞元方法 (computational cell methodology, CCM) 与 EET 和 CZM 都有相似之处. 裂尖前方空隙生长形成裂纹扩展. 空隙生长被限制于一薄层内, 厚度等于夹杂之间的平均距离. 夹杂导致空隙的产生. 薄层由立方体胞组成, 每一个胞元包含一个给定尺寸的空腔. 每一个胞元中空隙的生长利用 Gurson-Tvergaard 模型来描绘. 当在胞元中空隙体积分数达到某一个临界值时, 除去胞元则裂纹生长.

1997 年 Broberg^[96] 在他所用的材料胞元模型中, 给出裂纹生成的胞元模型的广义公式. 在其模型中, 材料假定由胞元组成 (定义为包含材料中关于裂纹生成的合理而充分的信息的最小材料单位); 胞元由其自己的尺寸和黏结与脱黏的关系来刻画. 如果被考虑的胞元作为在 FE 网格中一个单元, 这样的一种方法代表了广义的 EET, CCM 和 CZM 模型.

材料的胞元模型与 Moorthy 和 Ghosh^[53] 提出的 Voronoi 胞元方法有许多基本相近点. 两种模型中材料都是被划分成具有代表性的最小材料单位. 他们的尺寸和性质不一样, 在 FE 网格中作为有限单元.

Broberg 的材料胞元模型和计算胞元方法可以模拟微裂纹产生和裂纹扩展 (利用单个微观范围破坏准则), 这是这些方法与 EET 一样具有的重要优点.

利用黏结区模型或计算胞元方法结合单位胞元放置于扩展裂纹的前方可以研究裂纹生成机制和材料结构对裂纹扩展的影响. 1997 年 Andersson^[97] 用裂尖前方空隙生成、聚结来模拟裂纹的扩展. 他利用了一个轴对称圆柱形体胞 (对于一个含球形空洞的理想刚塑性材料). 变化空隙

尺寸与胞元半径的比例, 作者发现在空隙生长过程中单位断裂表面的能量耗散与空洞之间距离成正比. 利用球形空洞位于胞元中心的轴对称体胞, Tvergaard 和 Hutchinson^[98] 分析了陶瓷间一韧性薄层空洞生长来决定裂纹生成的面力分离律.

黏结表面模型 (cohesive surface model, CSM)^[91] 给出了一种黏结区模型 (CZM) 版本. 这种模型的主要特色是脱黏准则不包含于黏结系统的两部分薄层材料的本构关系中. 在这个模型中脱黏准则由法向表面力通过黏结表面传递所控制. 脱黏准则 (如法向表面力达到一临界值则发生) 镶嵌于边界值问题中, 作为沿裂纹假设路径的另外一个边界条件. 黏结表面模型使裂纹初始延伸被描述成从一个自由表面或从一个已经存在的裂纹经过裂纹生长直到裂纹停止.

1996 年 Vroonhoven^[99] 提出的混合断裂/损伤方法 (hybrid fracture/damage approach, HFDA) 框架中, 利用了所谓的“超级单元”, 由一个单元 (裂尖单元) 和几个变节点单元组成的 (由一个奇异单元转变为一个线性四节点单元). 这个单元安放于扩展裂纹的尖端. 在裂尖处, 材料刚度在每一个时间步减小 1000 倍 (动态模拟裂纹扩展). 利用 J 积分作为裂纹扩展的一个准则 (在超级单元内的等值线上). MATLAB 程序已实施了这种方法, FE 网格由 SEPRAN 产生.

将模拟裂纹扩展和损伤演化结合于一个模型中, HFDA 是一种可选方法. 在 EET 和 CSM 中, 利用相同的损伤模型来模拟裂纹扩展和损伤演化. 这样, 裂纹事实上被当作一个根据局部损伤准则而损伤的单元簇.

HFDA 是在断裂力学和连续介质损伤力学基础上, 将裂纹和损伤扩展的有限元模型结合在一起, 避免两种方法的缺点 (对于断裂力学模型要求 FE 网格不断地自适应, 而在损伤模型中网格和损伤局部化非常敏感).

裂纹被模拟成在一些刚度减小的单元, HFDA 可看作裂纹抹平模型的一个版本. 事实上, 对于 CZM 和 CCM 模型同样成立. 在两种方法的框架中, 裂纹都被模拟成在一些薄层材料上抹除. 具体的评论和不同抹平裂纹模型的分析 (经常用于混凝土断裂模拟中) 可参见文献 [100]. 在裂纹抹平模型 (smeared crack models) 中^[101] 裂纹被当作一个沿过程区的连续衰变 (强度和刚度减小). 在裂纹贯穿的一些特征距离 (由单元尺寸来相互联系) 上抹去位移跳跃. 单个破坏面的衰变由本构关系来描述. 在固定裂纹模型中^[85] (代表裂纹抹去模型的经典版本), 衰变仅由最大拉伸应力控制. 其它裂纹抹去模型的版本 (如转动裂纹模型, 双重固定模型) 可以考虑裂纹扩展方向的变化和次级裂纹的产生.

镶嵌裂纹模型 (embedded crack model, ECM) 由 Jirasek^[84] 提出, 通过选择局部化断裂的运动学表示, 将模拟裂纹离散和抹平两种方法的优点结合起来. ECM 利用了含镶嵌非连续线或局部化带的有限单元. 此非连续线穿过单元并将单元划分成两部分, 含非连续单元的本构关系由表面力分离定律和应力 - 应变关系共同给出. 这种方法和上面所述的多相单元相似: 材料行为的非连续不是反映在有限元模型中, 而是反映在方法的形成过程中.

比较上述方法, 不难给出他们的一些典型特征:

- 体胞方法 (VCA) 可以用来模拟断裂的初始阶段 (离散孔洞的形成), 也可用来决定局部破坏的准则, 此准则可进一步应用于孔洞生成而形成裂纹的模型中. 体胞方法的主要优点是可以考虑材料结构和三轴应力对初始损伤的影响. 这样由介绍 UCA 的一些结果到裂纹生成的概念^[88,97] 或将这两概念^[91] 联系起来赋予了在裂纹生成模型中的夹杂更多真实的物理影响. 如果利用 UCA 来确定局部破坏准则 (而不是一般所用的热力学或经验损伤模型), 我们又得涉及等级模型.

- 有限元模拟损伤最普通的问题是网格的依赖性, 虽然可以通过特殊长度尺度^[88] 的引入或将网格尺寸作为一个单独参数得到部分弥补; 在局部方法中^[91] 这个问题对于材料细观力学损

仿模拟仍是一基本问题.

- 在几个被广泛承认的方法中 (CZM, CSM), 裂纹路径事先给定, 是一个强加的假设, 不可能分析材料结构对裂纹扩展的影响.

- 一般地, 材料的微观结构仅在某些断裂模型中加以考虑 (EET 及一些体胞模型中), 但这仍然是细观力学的一个主要问题. 利用 UCA 决定局部损伤分数, 也可以在基于孔洞生成、形成裂纹扩展模型的框架中, 将填充物 / 基体性质和颗粒的体积分数考虑进去. 结合模拟材料微观结构变形的数值方法, 模拟裂纹扩展的方法应是数值模拟断裂的主要发展方向之一, 且可作为提高材料断裂阻力的基础. 我们可发现目前有一批这个方向的项目正在计划并进行着 (边界元方法, 参见文献 [102,103]; EET 和 MPE 模型, 参见文献 [2,15]).

- 大家注意到多相材料的结构和裂纹的形成可以通过一些特殊的含镶嵌界面 (多相单元) 和镶嵌裂纹的单元有效地加以考虑. 可以想象将材料的非连续考虑入 FE 模型中, 可以提供一个很有效的模拟真实材料的方法 (并不是借助于发展特殊模型).

6 材料优化

此部分考虑了材料优化方面的一些研究工作 (通过改变材料的微观结构), 并比较了材料模型和材料发展方向的工作和成就.

提高材料力学性能可以分为两组: 第一组即寻求影响材料的强度和刚度 (整体响应、硬化、流动强度), 第二组为寻求影响断裂韧性和阻力.

在第一组的研究中, Bao 等^[104]数值模拟了排列整齐、分布均匀的刚体颗粒 (在韧性材料中) 对材料整体性能的影响. 表明 (当颗粒的方向随机分布时) 形状不同的颗粒 (圆盘形、圆柱形、针形) 对弹塑性基体的影响几乎相同. 高长径比的针形或圆盘形颗粒相对于球形颗粒增强性更有效. 在给定长径比时, 排列好的针状颗粒比圆盘形增强效果某种程度上高一些.

1989 年 Christman 等^[105]基于 FE 模拟 MMC 的变形发现, 均匀排列分布的圆柱形颗粒比球形颗粒的增强作用明显.

1994 年 Zahl 和 McMeeking^[106]数值模拟了 MMCs 中界面的增强效应. 发现随着界面性质的改变, 流动强度也发生变化 (按递降的顺序): 强界面 — 法向黏结很强受剪切的界面 — 在夹杂侧边黏结很好而端部脱黏的界面.

1991 年 Llorca 等^[76]模拟了 SiC 增强 Al 合金的变形. 作者得出结论是, 对应晶须状增强相的应变硬化和流动强度达到最大值, 而对应球形的则最小. 但对于球状的破坏应变最大, 而晶须增强复合材料的破坏应变则较小. 颗粒增强相传递最大强度; 但破坏应变则一般. 这些作者还发现晶须垂直簇集降低了整个流动强度, 与均匀排列的相比较, 孔洞生成率比较慢. 垂直簇集导致比较小硬化指数和比较大的延性, 但和均匀排列的情况差别较小. 增强相成簇的影响对于颗粒或球形加强复合材料的影响远没有晶须增强的复合材料受到的影响强.

1993 年 Böhm 等^[14,19]发现轴向载荷状态下, 纤维增强复合材料的整体响应几乎与纤维排列无关, 而横向载荷状态下弹性模量和屈服极限在下列次序呈下降趋势: 周期方形排列在 0° 方向 — 周期六边形排列 — 145° 方向周期方形排列.

1996 年 Fang 等^[38]发现在他们的模拟中给定方向上长径比越大, 复合材料增强越有效. 功硬化率和有效弹性模量随增强相形状变化而改变 (下降次序): 长方形平行管状颗粒 — 圆柱形、立方体 — 球形.

1998 年 Soppa 等^[63,64]模拟了人造微观结构含非金属夹杂的金属变形, 发现颗粒簇集越

强，在层里局部化，则剪切局部化和应力集中越大。

我们可以注意到上述模型中有些共同的特征：他们都利用了非常理想化的材料模型（大多数为二维胞模型），都是以数值模拟为基准（虽然我们收集的与分析方法无关）。然而不难发现那些周期性方形排列或矩形平行管状颗粒的结构在实验中几乎不可能实现。在大量的研究中，作者寻求提高材料抗断裂能力的方法。我们注意到下面给出的大多数对应于不同材料，但在材料发展中可以发现一些共同趋势：

Evans 等^[107,108]研究了高温工程陶瓷和陶瓷基复合材料的损伤和断裂机制。他们发现了下列一些提高材料韧性的方法：

(1) 控制微观断裂（也就是材料包含大量脆性二相颗粒，在宏观裂纹生长的应力场中破坏，这样在裂纹扩展中增加了能量消耗）。这种方法不能提高断裂强度。

(2) 韧性二相网络状。韧性二相圆柱形颗粒（实际上可认为是沿晶粒边界三相点，韧性相的连续网状组织）比球形二相颗粒增强效果更好。

(3) 摩擦增强（在材料中包含强排列的增强相但弱界面，而脱黏允许由于内部摩擦而耗散来实现），这个机制比延性相增强更有效（通过延性增强相在弹性基体中来实现）。

1994 年 Raj 和 Thompson^[109] 理论研究了 Ni/Al₂O₃、Pb/MgAl₂O₄ 及 WC/Co 的行为及其他复合材料，发现含由脱溶物形成的连续网状组织的 MMC 的断裂强度（如 WC/Co，Al-Al 由液相沉积或 L 过程产生）远比含分散颗粒的高（通过热压，金属和氧的粉状混合物，然后压缩氧进入金属而制）。1979 年 Chermant 和 Osterstock^[110] 以及 1981 年 Luycks^[111] 证实了 WC/Co 硬合金的断裂强度随 WC 相距离增大而提高。

1992 年 Watanabe 和 Kawasaki^[112] 实验研究了陶瓷沉积金属的功能梯度复合材料（热压和 HIP），发现两种可以提高断裂阻力的方法：

(1) 提高金属相的连通性（Betty 数）导致断裂韧性提高。

(2) 通过在陶瓷丰裕区将金属和纤维混合，提高裂纹延滞功能。

Mishnaevsky 等^[113,114] 模拟了高速钢（HSS）中裂纹扩展。HSS 被认为主要由碳化物和基体组成的两相材料。利用多相有限元和单元消除技术，作者首先模拟了在 HSS 真实微观结构中的裂纹扩展，为了证实方法的可行性，然后模拟了含带状、网状、及随机分布的不同尺寸的碳化物钢在计算机设计人工制造的微观结构中的裂纹生长。数值模拟中确定了特殊表面能、断裂尺寸、断裂表面韧性。

作者观察到下列几种可以提高材料断裂韧性的方法：

- 由于碳化物层垂直于初始裂纹路径而使裂纹偏转（在网状粗糙的微观结构中和带状微观结构中观察到）。

- 裂纹沿碳化物的网状路线扩展（网状精细微观结构）

- 损伤在钢中的随机位置形成且裂纹分叉（随机微观结构）

Mishnaevsky 等^[113,114] 发现钢的抗阻能力一般按下列顺序增强：带状—随机—网状微观结构。观察到断裂的几何与能量参数之间的关系为：随着断裂尺寸的增大和断裂面韧性断面高度的增大，断裂韧性增大。

1998 年 Tan 和 Yang^[115] 研究了纳米复合材料（含铝陶瓷，弥散 Si 纳米颗粒增强），表明颗粒沿晶粒边界分布于基体晶粒中可以使纳米陶瓷复合材料的韧性提高。观察到三种韧化机制：

(1) 纳米颗粒沿晶界分布，由晶粒间裂纹转换为穿晶裂纹。

(2) 齿状裂纹路径提高了断裂表面粗糙度（晶粒内纳米颗粒获得波动式残余应力）

(3) 在裂尖附近形成由扎钉式粗糙表面引起的屏蔽。

1988年 Sigl 等^[116]用解析方法及数值方法研究了由延性相增强的脆性材料 ($\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}$ 和 WC/Co 复合材料). 他们发现利用单轴断裂功比较大、初始孔洞平均应变比较大的延性相来增强脆性材料, 特别是伴随基体中存在压缩残余应力, 材料就可以获得比较高的韧性.

1994年 Broeckmann^[17]和 1996年 Gross-Weege 等^[57]数值模拟及实验研究了莱氏体铬钢的损伤和断裂. 发现钢的断裂韧性通过以下方法得到提高:

1) 增大裂纹路径的宽度 (在硬化低温状态, 增大网状结构钢中的胞元尺寸, 或利用网状结构代替带状结构来实现).

2) 提高裂纹路径穿过的那部分基体的延性 (在软的退火状态, 增大基体延性如增大回火温度来实现).

1998年 Berns 等^[117]在数值模拟和实验研究的基础上, 发展了一种含双弥散微观结构的新材料 (也就是粗硬相由小碳化物的密集分散系代替), 与那些常规使用于冷制工具的材料相比, 可以保证足够高的断裂韧性、寿命、耐磨性和弯曲强度.

1993年 Holmes 与 Chermant^[118]实验研究了纤维增强陶瓷基复合材料的抗蠕变性能, 表明在蠕变不匹配率 (CMR) 小于 1 比大于 1 的情况下, 更能提高复合材料的抗蠕变性. 且由于基体断裂和纤维桥联机制促使损伤加快形成. 这个结论不适用于高单调韧性的材料, 因为在这种情况下, 损伤模式趋于基体的断裂和界面脱黏.

提高材料韧性和强度的一个很有前途的方法是利用加载固体中的相转移与应变状态之间的关系. 这样通过高强度和高延性现象, 伴随在延性材料中的马氏体相变换, 可以产生具有高延性和拉伸强度的钢^[119~122].

由上述分析可见, 在提高多相材料断裂韧性的许多方法中, 人们可注意到:

- 加入第二相颗粒或由此产生网状结构随裂纹在第一相中生长时有能量消耗 (如摩擦, 附加产生的微裂纹等), 因此可增大材料的断裂韧性.

- 创造一种夹杂排列方式使得裂纹偏离通常的路径 (如其在均质材料中的情形) (这可通过延性夹杂来实现, 如在陶瓷密集区将金属和纤维预先混合^[112], 或在弱界面^[107,108], 或在颗粒簇集的特殊安排等; 例如在工具钢中通过碳化物密集区网状结构来实现).

- 变化网状结构的角度 (有利于抗断裂性能), 硬性延性夹杂的连缀性 (正负效应都可能).

材料的强度与他们抗断裂性能相反, 随延性基体的晶粒尺寸减小而提高^[2]. 材料的弹性常数随复合材料的长径比增大而提高^[38].

从分析中可以得到如下结论: 随着提高材料力学性能的化学和微观的方法, 也出现了细观方面的方法, 也就是材料的力学性能在未改变各相本身性质的情况下, 可以通过改变二相材料中相的分布和排列获得提高.

7 结 论

基于以上一些在材料计算细观力学中的最近研究新成果, 我们可以得出一些关于不同数值方法的发展和应用, 及为材料设计而产生的方法等方面的结论:

首先考虑一下细观力学中有关计算方法的进一步发展前景:

关于体胞模型的应用, 我们注意到以下趋势:

- 更接近于材料真实结构的更复杂的非规则的体胞 (偏心体胞, 含脱黏或断裂颗粒的体胞, 含几个颗粒的体胞).

- 等级或多尺度模型, 超级单元或层状的或网络状组合的体胞, 体胞含有自洽镶嵌或非自洽

的夹杂, 夹杂性能是材料中一定的体积平均或一定数量的夹杂的平均性质等等.

事实上, 我们可以说, 体胞方法是从绝对周期性结构的特殊材料模型向具有最小程度规则性的材料都可应用的方向发展.

真实结构的模拟非常困难, 但也取得了重要的发展: 从单相有限元 (只可模拟简单二维真实结构) 到多相单元. 多相单元法使模拟材料复杂的三维结构成为可能, 而且比较容易地生成所有单元边界都沿着相边界的有限元网格. 将来, 在没有任何结构规则性的情况下, 可采用真实结构模拟材料的行为或采用不规则结构进行模拟比规则的能更好地得到材料的行为. 真实材料结构模拟另一个比较重要的应用是研究材料结构对断裂参数的影响. 显然, 在大量裂纹的材料中不存在规则性和周期性.

上面提到的与体胞方法发展趋势相联系的等级模型, 提供了材料模型发展前景的另一种可能性, 即

- 将基于物理的材料微观模型与材料行为的细观模拟 (微 - 细观模拟) 相结合. FEAt (有限元与原子耦合: 一个原子区域被有限元连续介质包围, 为了调解在局部连续介质中和非局部的原子区域中力的不同定义, 引进了一个过渡区. 其中原子区和连续介质区重叠, 且有限元节点一一对应于原子, 通过相互位移边界条件而耦合)^[123] 和晶体塑性模型 (材料被看作由晶粒或单晶组成的, 每一个有自己的晶格方向和滑移系的几何形状; 使得考虑不同结晶体取向对材料行为的影响成为可能)^[124] 正是基于这种模拟方法.

从上面模拟损伤和断裂的分析可见, 整个过程可用下列方法之一进行模拟:

- 在局部应力高度集中的有限单元中, 应力和杨氏模量全置零 (EET, CCM)
- 假设裂纹扩展的那一层材料中刚度衰减 (CZM, 虚拟裂纹模型)
- 扩展裂纹的假想路径用一个接触平面来代替 (CSM, 由 Eberle 和 Klingbeil^[78] 提出的体胞模型)

黏结区断裂模型 (CSM, CZM) 的弱点是必须预先确定裂纹路径 (至少在现有的这些模型中). 利用这些模型设计高抗断裂材料的这种理想化 (与体胞方法中要求材料的周期性结构相似) 带来了很大的局限性. 在虚拟裂纹模型中也存在一个类似的问题, 但预先多向固定裂纹及自适应固定裂纹模型可成功地解决此问题^[101]. 因此, 避免预先假设裂纹路径是这些模型进一步发展的一个方向, 这样可以考虑材料结构对裂纹扩展的影响. 与此相联系的是, 单元消除法为模拟孔隙形成, 生长及裂纹扩展提供更显著的可能性. 这样就可以考虑材料的真实结构. 这种方法可以研究材料结构对裂纹路径和材料抵抗断裂能力的影响. 因此该方法可以作为设计材料具有高抗断能力的数值基础. 在以上分析的基础上, 可以给出一个可能作为材料优化设计的 (基于计算细观力学方法) 计划, 包括以下步骤:

(1) 基本步骤

- 基于实验及热动力学方法等等, 分析材料制作和加工对微观结构的影响. 如: 沉积过程及温度对硬合金晶粒尺寸和邻近距离的影响, 热加工对高速钢中结构类型的影响.

- 基于对所考虑材料制作的工件服役条件的分析, 确定要提高的必要性能.

(2) 材料分析

- 材料结构的图象分析 (从材料切片的数字显微图)
- 寻找微观结构中的规则性或周期性
- 确定材料中损伤机制 (脱黏, 颗粒破坏等)

(3) 细观力学模拟

• 如果材料结构是周期性的 (如显微增强复合材料 (FRC)), 随机的或局部化的, 必须研究材料结构对本构关系的影响 (UCA 研究周期性结构; RSS 非周期性结构).

• 大多数可能的情况: 如果仅在一个层次上是规则的, 在其它尺度层次上为随机结构 (如高速钢含碳化物带的网状结构, 带中的碳化物随机分布), 必须发展一种部分结构规则性的分级模型, 如 UCA 与统计方法, 平均方法, 梯度材料模型相结合等.

• 如材料的损伤和抗断性能也需要优化, 必须使用含损伤的 UCA (如初始损伤决定时间的寿命), 或利用上述方法中的一种模拟裂纹生长.

(4) 结构优化, 优化材料的产品及测试.

作者认为这种建议的方法可作为考虑材料真实结构、材料结构优化和设计的一般基准. 然而由上文可以看出, 材料优化的典型路径仍保持唯象学 / 实验 / 分析这一套. 也就是关于材料优化的可能性所作的一些假设是基于实验或一般物理原理, 必须靠实验来测试, 基于唯象学或理论模型来优化. 必须注意依靠接近真实的模拟和实验手段来优化材料仍然十分困难.

可以找出对模拟材料行为方法的改进, 考虑微结构的工作和拟发展的真实材料仍然互相孤立并各行其道. 但不久的将来, 可以想象简单的材料优化的量化方法, 可能被彻底研究. 数值技术一直以这样方式在发展: 考虑微观真实结构, 对材料行为的有效模拟. 考虑大量微观结构 (不同相的不同破坏机制, 变形, 簇集效应等) 的相互作用的同时, 在一些参数上 (如抗断能力, 流动强度和耐磨性能) 为优化材料的需要, 将会使数值方法 (主要是有限元方法) 成为材料优化的主要途径.

参 考 文 献

- 1 Mishnaevsky Jr L. A new approach to the analysis of strength of matrix composites with high content of hard filler. *J App Composite Mat*, 1995, 1: 317~324
- 2 Mishnaevsky Jr L, Lippmann N, Schmauder S, Gumbsch P. In-situ observations of damage evolution and fracture in AlSi cast alloys. *Eng Fracture Mech*, 1999a, 63(4): 395~411
- 3 Mishnaevsky Jr L, Dong M, Höhnle S, Schmauder S. Computational mesomechanics of particle-reinforced composites. *Comput Mat Sci*, 1999b, 16(1-4): 133~143
- 4 Kanzaki S, Shimada M, Komeya K, Tsuge A. Recent progress in the synergy ceramics project. *Key Eng Mat*, 1999, 161-163: 437~442
- 5 Needleman A. Computational mechanics at the mesoscale. *Acta Mat*, 2000, 48(1): 105~124
- 6 Panin V (ed). *Physical Mesomechanics of Heterogeneous Media and Computer-Aided Design of Materials*. Cambridge Int Sci Publ, 1998
- 7 Raabe D. *Computational Materials Science the Simulation of Materials Microstructures and Properties*. Wiley-VCH, Weinheim, 1998
- 8 Ferziger J H. *Numerical Methods for Engineering Application*. New York: Wiley, 1981
- 9 Chen L. *Computer Simulation and Prediction of Thermal Stress and Final Distortion in Quenching Processes*, http://www.cse.ogi.edu/~leochen/quench_rev/qualify.htm1, 1996
- 10 Zienkiewicz O C. *Finite Element Method*. London: McGraw-Hill, 1986
- 11 Brebbia C A. *The Boundary Element Method for Engineers*. London: Pentech Press, 1978
- 12 Lemos J, Hart R D, Cundall P A. A generalized distinct element program for modelling jointed rock mass. In: Stephansson O, ed. *Fundamentals of Rock Joints*. Lulea: Centek Publishers, 1985
- 13 Munjiza A. Fracture, fragmentation and rock blasting models in the combined finite-discrete element method. In: Aliabadi M H, ed. *Fracture of Rock*. Comput Mech Publications, 1998. 125~166
- 14 Böhm H J, Rammerstorfer F G. Micromechanical models for investigating fibre arrangements in MMC's. In: *Proc Int Seminar Micromechanics of Materials (MECAMAT)*, 1993. 383~394
- 15 Wulf J. *Neue Finite-Elemente-Methode zur Simulation des Duktilbruchs in Al/SiC Dissertation MPI für Metallforschung*. Stuttgart, 1995

- 16 Tellaeche Reparaz M, Martinez-Esnaola J M, Urcola J J. Numerical simulation of plane strain compression tests of a bimetallic composite. *Key Eng Mat*, 1997, 127-131: 1215~1222
- 17 Broeckmann C. Bruch karbidreicher Stähle - Experiment und FEM-Simulation unter Berücksichtigung des Gefüges. Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 1994
- 18 Höhle S, Dong M, Mishnaevsky Jr L, Schmauder S. FE-simulation of damage evolution and crack growth in two-phase materials on macro- and microlevel on the basis of element elimination technique and multiphase finite elements. In: Proc 2nd European Conf Mechanics of Materials, Magdeburg, 1998. 189~196
- 19 Böhm H J, Rammerstorfer F G, Weisenbek E. Some simple models for micromechanical investigations of fiber arrangement effects in MMCs. *Comput Mat Sci*, 1993, 1: 177~194
- 20 Dong M, Schmauder S. FE modelling of continuous fiber and particle reinforced composites by self-consistent embedded cell models. *Computational Methods in Micromechanics*, 1995, AMD Vol 212/MD Vol 62, ASME: 81~86
- 21 Brockenborough J R, Suresh S, Wienecke H A. Deformation of metal-matrix composites with continuous fibers: geometrical effects of fiber distribution and shape. *Acta Metall Mat*, 1991, 39(5): 735~752
- 22 Shen Y L, Finot M, Needleman A, Suresh S. Effective elastic response of two-phase composites. *Acta Metall Mat*, 1994, 42(1): 77~97
- 23 Sovik O P. Experimental and numerical investigation of void nucleation in AlMgSi alloy. *J Physique*, 1996, 10(C6): 155~165
- 24 Michel J C. A numerical study of the effects of particle cracking and particle debonding on matrix void growth in Al-SiC composites. In: Proc Int Seminar Micromechanics of Materials (MECAMAT), Editions Eurolles, Paris, 1993. 395~405
- 25 Ellyin F, Xia Z, Meijer G. Effect of multiaxial cyclic loading on the damage of particulate reinforced MMC's. In: Proc Int Seminar Micromechanics of Materials (MECAMAT), Editions Eurolles, Paris, 1993. 418~425
- 26 Mozhev V V, Kozhevnikova L L. Unit cell evolution in structurally damageable particulate-filled elastomeric composites under simple extension. *J Adhesion*, 1996, 55: 209~219
- 27 Mozhev V V, Kozhevnikova L L. Highly predictive structural cell for particulate polymeric composites. *J Adhesion*, 1997, 62: 169~186
- 28 Höhle S. Micromechanical modelling of deformation and fracture of graded WC/Co Hard Metals, Dissertation, Univ of Stuttgart, 1998
- 29 Dong M, Schmauder S. Transverse mechanical behaviour of fiber reinforced composites - FE modelling with embedded cell models. *Comput Mat Sci*, 1996, 5: 53~66
- 30 Leßle P, Dong M, Soppa E, Schmauder S. Selbstkonsistente Matrixitätsmodelle zur Simulation des mechanischen Verhaltens von Verbundwerkstoffen. In: Friedrich K, ed. Proc Tagung Verbundwerkstoffe und Werkstoffverbunde. Kaiserslautern, 1997. 765~770
- 31 Schmauder S, Soppa E, Weber U, Mishnaevsky Jr L, Mintchev O. Simuliertes Verformungs- und Bruchverhalten hilft beim Optimieren von Keramik-Metall-Verbunden. *Maschinenmarkt*, 2000, 106(12): 54~58
- 32 Axelsen M S. Quantitative description of morphology and microdamages of composite materials, PhD Thesis, Aalborg University, 1995
- 33 Axelsen M S, Pyrz R. Microstructural influence on the fracture toughness in transversely loaded unidirectional composites. In: Proc 10th Int Conf Composite Materials, 1995. 471~478
- 34 Antretter T, Fischer F D. Critical shapes and arrangements of carbides in high-speed tool steels. *Mat Sci Eng*, 1997, A237: 6~11
- 35 Siegmund T, Werner E, Fischer F D. Structure-property relations in duplex materials. *Comput Mat Sci*, 1993, 1: 234~240
- 36 Plankensteiner A F, Böhm H J, Rammerstorfer F G, Buryachenko V A. Hierarchical modelling of high speed steels as layer-structured particulate MMCs. *J de Physique IV*, 1996, 6: 395~402
- 37 Plankensteiner A F, Böhm H J, Rammerstorfer F G, Pettermann H E. Multiscale modelling of highly heterogeneous particulate MMCs. In: Proc 2nd European Conf Mechanics of Materials, Magdeburg, 1998. 291~298
- 38 Fang D, Qi H, Tu S. Elastic and plastic properties of metal-matrix composites: geometrical effects of particles. *Comput Mat Sci*, 1996. 6: 303~309

- 39 Kuna M, Zun D S. Analyses of void growth and coalescence in cast iron by cell models. In: Proc Euromech-Mecamat Conference Local Approaches to Fracture, Fontainebleau, 1996
- 40 Kuna M, Zun D S. Three-dimensional cell model analyses of void growth in ductile materials. *Int J Fracture*, 1996b, 8: 235~258
- 41 Geni M, Kikuchi M. Damage analysis of aluminum matrix composite considering non-uniform distribution of SiC particles. *Acta Mat*, 198, 46(9): 3125~3133
- 42 Kikuchi M, Geni M. Evaluation of the interaction effects of SiC particles during damage process of MMCs. *Key Eng Mat*, 1998, 145-149: 895~900
- 43 Iung I, Petitgand H, Grange M, Lemaire E. Mechanical behaviour of multiphase materials Numerical simulations and experimental comparisons. In: Proc IUTAM Symposium on Micromechanics of Plasticity and Damage in Multiphase Materials, Kluwer, 1996. 99~106
- 44 Wulf J, Schmauder S, Fischmeister H F. Finite element modelling of crack propagation in ductile fracture. *Comput Mat Sci*, 1993, 1: 297~301
- 45 Lippmann N, Steinkopff Th, Schmauder S, Gumbsch P. 3D-Finite-Element-modelling of microstructures with the method of multiphase elements. *Comput Mat Sci*, 1997, 9: 28~35
- 46 Hollister S J, Kikuchi N. Homogenization theory and digital imaging: A basis for studying the mechanics and design principles of bone tissue. *Biotech Bioeng*, 1994, 43: 586~596
- 47 Terada K, Kikuchi N. Global-local constitutive modeling of composite materials by the homogenization method. *Mat Sci Res Int*, 1996a, 2: 73~80
- 48 Terada K, Kikuchi N. Microstructural design of composites using the homogenization method. *Mat Sci Res Int*, 1996b, 2: 65~72
- 49 Ljungberg A B, Chatfield C, Hehenberger M, Sundström B. Estimation of the plastic zone size associated with cracks in cemented carbides. In: Proc 2nd Int Conf Science Hard Materials, Chapter 7, Adam Hilger Ltd, 1986. 619~630
- 50 Fischmeister H F, Schmauder S, Sigl L. Finite Element modelling of crack propagation in WC-Co hard metals. *Mat Sci Eng*, 1988, A105/106: 305~311
- 51 Tack L H. Integration Mikromechanischer Werkstoffmodelle in die Methode der finiten Elemente. Verl der GOM, Herzogenrath, 1995
- 52 Carter W C, Langer S A, Fuller Jr E R. The OOF Manual: Version 1086. <http://www.ctcms.nist.gov/oof/download/Manual/Manual.html>, 2000
- 53 Moorthy S, Ghosh S. A voronoi cell finite element model for particle cracking in elastic-plastic composite materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1998, 151: 377~400
- 54 Ghosh S, Lee K, Moorthy S. Multiple analysis of heterogeneous elastic structures using homogenization theory and Voronoi cell finite element method. *Int J Solids Struct*, 1995, 32(1): 27~62
- 55 Lee K, Moorthy S, Ghosh S. Multiple scale computational model for damage in composite materials. *Comput Methods Appl Mech Eng*, 1999, 172: 175~201
- 56 Li M, Ghosh S, Richmond O. An experimental-computational approach to the investigation of damage evolution in discontinuously reinforced aluminium matrix composite. *Acta Mat*, 1999, 47(12): 3515~3532
- 57 Gross-Weege A, Weichert D, Broeckmann C. Finite Element simulation of crack initiation in hard two phase materials. *Comput Mat Sci*, 1996, 5: 126~142
- 58 Berns H, Broeckmann C, Weichert D. The effect of coarse second phase particles on the creep behaviour of hard metallic alloys. *Key Eng Mat*, 1996. 118~119
- 59 Sautter M. Modellierung des Verformungsverhaltens Mehrphasiger Werkstoffe mit der Methode der Finiten Elemente. Fortschr-Ber VDI Reihe 5, Duesseldorf, 1995
- 60 Steinkopff Th, Sautter M. Simulating the elasto-plastic behavior of multiphase materials by advanced finite element techniques. *Comput Mat Sci*, 1995, 4: 10~22
- 61 Lippmann N, Schmauder S, and Gumbsch P. Numerical and experimental study of early stages of the failure of AlSi-cast alloys. *J de Physique IV*, 1996, 5, III, C6: 123~131
- 62 Lippmann N, Lehmann A, Steinkopff Th, Spies H J. Modelling the fracture behaviour of high speed steels under static loading. *Comput Mat Sci*, 1996, 7: 123~131

- 63 Soppa E, Schmauder S, Fischer G. Numerical and experimental investigations of the influence of particle alignment on shear band formation in Al/SiC. In: Carstensen J V, eds. Proc of 19th Risoe Symp on Materials Sci "Modelling of Structure and Mechanics of Materials from Microscale to Product". Roskilde, Denmark, 1998. 499~504
- 64 Soppa E, Schmauder S, Fischer G, Thesing N J, Ritter R. Hierarchische werkstoffmodellierung von metallkeramik-verbundwerkstoffen mit hilfe von finite-elemente-methode. In: Streckharde A, ed. Proc XXV FEM-Kongress. Ennigerloh, 1998. 149~160
- 65 Rohde J, Schmauder S, Bao G. Mesoscopic modelling of gradient zones in hardmetals. *Comput Mat Sci*, 1996, 7: 63~67
- 66 Rohde J. Mesoskopische Modellierung des Versagensverhaltens beschichteter gradierter Hartmetalle, Dissertation, University of Stuttgart, 1998
- 67 Poehch M H, Fischmeister H F, Kaute D, Spiegler R. FE-modelling of the deformation of WC-Co alloys. *Comput Mat Sci*, 1993, 1: 213~224
- 68 Garboczi E J, Day A R. An algorithm for computing the effective linear elastic properties of heterogeneous materials: 3-D results for composites with equal phase Poisson ratios. *J Phys Mech Solids*, 1995, 43: 1349~1362
- 69 Bentz D P, Garboczi E J, Jennings H M, Quenard D A. Multi-scale digital-image-based modelling of cement-based materials. In: MRS Proc Microstructure of Cement-Based Systems/Bonding and Interfaces in Cementitious Materials, 1995, 370: 33~43
- 70 Garboczi E J, Bentz D P, Snyder K A, Martys N S, Stutzman P E, Ferr C F. Modelling and Measuring the Structure and Properties of Cement-Based Materials, 2000. <http://ciks.cbt.nist.gov/garboczi/>
- 71 Zohdi T, Wriggers P. Toward computationally rapid analysis and design of material microstructure and macrostructure, Presentation at GAMM-Jahrestagung, Bremen, 1998, April, 6~9
- 72 Zohdi T, Wriggers P. A domain decomposition method for bodies with heterogeneous microstructure based on material regularization. *Int J Solids Struct*, 1999, 136: 2507~2527
- 73 Zohdi T, Wriggers P. Microstructural decomposition error estimates. *ZAMM*, 1999, 79: 155~158
- 74 Mishnaevsky Jr L. Determination for the time to fracture of solids. *Int J Fracture*, 1996, 79(4): 341~350
- 75 Bao G. A micromechanical model for damage in metal matrix composites. *Damage Mechanics and Localization*, 1992, AMD-Vol 142/MD-Vol 34: 1~12
- 76 Llorca J, Needleman A, Suresh S. An analysis of the effects of matrix void growth on deformation and ductility of metal-ceramic composites. *Acta Metall Mat*, 1991, 39(10): 2317~2335
- 77 Walter M E, Ravichandran G, Ortiz M. Computational modelling of damage evolution in unidirectional fiber reinforced ceramic matrix composites. *Comput Mech*, 1997, 20: 192~198
- 78 Eberle A, Klingbeil D. Durchführung von Zellmodellrechnungen mit dem FE-Programm ABAQUS und der Riks-Methoden, BAM-V31 Bericht 96/1 (Report of the Federal Institute for Materials Research and Testing), Berlin, 1996
- 79 Brocks W, Hao S, Steiglich D. Micromechanical modelling of the damage and toughness behaviour of nodular cast iron materials. In: Proc EUROMECH-MECHAMAT Conf Local Approaches to Fracture, Fontainebleau, 1996
- 80 Sun D Z, Sester M, Schmitt W. Development and application of micromechanical material models for the characterization of materials. In: Proc Euromech-Mecamat Conf "Local Approaches to Fracture 86-96", Fontainebleau, 1996
- 81 Mishnaevsky Jr L, Schmauder S. Damage evolution and localization in heterogeneous materials under dynamical loading: stochastic modelling. *Comput Mech*, 1997a, 20(7): 89~94
- 82 Mishnaevsky Jr L, Schmauder S. Damage evolution and heterogeneity of materials: model based on fuzzy set theory. *Eng Fracture Mech*, 1997b, 57: 625~636
- 83 Saouma V. Lecture Notes in Fracture Mechanics. Univ of Colorado, Boulder, 1995
- 84 Jirasek M. Finite elements with embedded cracks. LSC Report, Lausanne, EPFL, 1998
- 85 Rashid Y R. Ultimate strength analysis of prestressed concrete pressure vessels. *Nucl Eng Des*, 1968, 7: 334~344
- 86 Stern M, Becker EB. A conforming crack tip element with quadratic variation in the singular fields. *Int J Numer Methods Eng*, 1978, 12: 279~288
- 87 Nishioka T, Murakami R, Takemoto Y. The use of dynamic Jintegral (J') in finite-element simulation of mode I and mixed-mode dynamic crack propagation. *Int J Pressure Vessels Piping*, 1990, 44: 329~352

- 88 Siegmund T, Bernauer G, Brocks W. Two models of ductile fracture in contest: porous metal plasticity and cohesive elements. In: Brown M W, de los Rios E R, Miller K J, eds. ECF 12 - Fracture from Defects, Proc 12th Europ Conf Fracture. EMAS, 1998. 981~985
- 89 Rossmannith H P, Knasmilner R, Mishnaevsky Jr L. Impact induced damage in rock. In: Rossmannith H P, ed. Proc 2nd Int Conf Mechanics of Jointed and Faulted Rocks. Balkema, Rotterdam, 1995. 103~108
- 90 Tvergaard V. Studies of void growth in a thin ductile layer between ceramics. *Comput Mech*, 1997, 20: 184~191
- 91 Mishnaevsky Jr L, Mintchev O, Schmauder S. FE-simulation of crack growth in 3-point bending tests using a damage parameter and the cohesive zone concept. In: Brown M W, de los Rios E R, Miller K J, eds. ECF 12 - Fracture from Defect, Proc 12th Europ Conf Fracture. EMAS, 1998, 2: 1112~1117
- 92 Wilsius J, Imad A, Nait Abdelaziz M, Mesmacque G, Eripret C. A comparative study of the Rice & Tracey and Rousellier models in the analysis of ductile tearing. In: Brown M W, de los Rios E R, Miller K J, eds. ECF 12 - Fracture from Defects, Proc 12th Europ Conf Fracture. EMAS, 1998, 2: 981~985
- 93 Xia L, Shih C F. Ductile crack growth - II Void nucleation and geometry effects on macroscopic fracture behavior. *J Mech Phys Solids*, 1995, 43(11): 1953~1981
- 94 Xia L, Shih C F. A fracture model applied to the ductile/brittle regime. In: Proc Euromech-Mecamat Conference "Local Approaches to Fracture 86-96", Fontainebleau, 1996
- 95 Xia L, Shih C F, Hutchinson J W. A computational approach to ductile crack growth under large scale yielding conditions. *J Mech Phys Solids*, 1995, 43(3): 389~413
- 96 Broberg K B. The cell model of materials. *Comput Mech*, 1997, 19(7): 447~452
- 97 Andersson H. Analysis of a model for void growth and coalescence ahead of a moving crack tip. *J Mech Phys Solids*, 1977, 25: 217~233
- 98 Tvergaard V, Hutchinson J W. Effect of T-Stress on mode I crack growth resistance in a ductile solid. *Int J Solids Struct*, 1988, 31(6): 823~833
- 99 van Vroonhoven J. Dynamic Crack Propagation in Brittle Materials: Analyses based on Fracture and Damage Mechanics. Eindhoven, Philipps Electronics, 1996. 195
- 100 Weihe S, Kröplin B, de Borst R. Classification of smeared crack models based on material and structural properties. *Int J Solids Struct*, 1998, 35(12): 1289~1308
- 101 Weihe S, Kroepflin B. Fictitious crack models: A classification Approach. In: Wittmann F H, ed. Proc Framcos II (2nd Int Conf Fracture Mechanics of Concrete and Concrete Structures). Aedificatio Publ, 1995, 2: 825~840
- 102 Leggoe J W, Hu X Z, Bush M B. Crack tip damage development and crack growth resistance in particulate reinforced metal matrix composites. *Eng Fracture Mech*, 1996, 53: 873~895
- 103 Bush M B. Simulation and assessment of crack behaviour in discontinuously reinforced composite materials. *Key Eng Mat*, 1997, V127-131: 1137~1144
- 104 Bao G, Hutchinson J W, McMeeking R M. Particle reinforcement of ductile matrices against plastic flow and creep. *Acta Metall Mat*, 1991, 39: 1871~1882
- 105 Christman T, Needleman A, Suresh S. *Acta Metall*, 1989, 37(11): 3029~3050
- 106 Zahl A B, McMeeking R M. The effect of interfacial properties on the flow strength of discontinuous reinforced metal-matrix-composites. *Mech Composite Mat Struct*, 1994, 1: 31~52
- 107 Evans A G. Design and life prediction issues for high-temperature engineering ceramics and their composites. *Acta Mat*, 197, 45(1): 23~40
- 108 Evans A G, Heuer A H, Porter D L. The fracture toughness of ceramics. In: Proc 4th Conf Fracture, Canada, 1997. 529~536
- 109 Raj R, Thompson L R. Design of the microstructural scale for optimum toughness in metallic composites. *Acta Metall Mat*, 1994, 42(12): 4135~4142
- 110 Chermant J L, Osterstock F. Elastic and plastic characteristics of WC-CO composite materials, *Powder Met Int*, 1979, 11(3): 229~235
- 111 Luyckx S B. Contiguity and the fracture process of WC-Co alloys. In: Francois D, ed. Advances in Fracture Research: Proc 5th Int Conf Fracture. Oxford, Pergamon Press, 1981. 1075~1081
- 112 Watanabe R, Kawasaki A. Improvement of ductility of ceramic rich region in functionally gradient materials by metal fiber premixing. In: Petzow G, Schneider G A, eds. Proc Internat Workshop Thermal Shock and Thermal Fatigue Behavior of Advanced Ceramics. Kluwer, 1992. 499~508

- 113 Mishnaevsky Jr L, Lippmann N, Schmauder S. Mesomechanical simulation of crack propagation in real and quasi-real idealized microstructures of tool steels. In: Proc 13th Europ Conf Fracture, Fracture Mechanics: Applications and Challenges (CD-ROM), San Sebastián, Spain, 2000
- 114 Mishnaevsky Jr L, Lippmann N, Schmauder S. Computational optimization of materials by varying the microstructures: some recent developments as applied to the improvement of fracture resistance of tool steels, 2000(in preparation)
- 115 Tan H L, Wie Yang. Toughening mechanisms of nanocomposites ceramics. *Mech Mat*, 1998, 30: 111~123
- 116 Sigl L S, Mataga P, Dalgleish B J, McMeeking R M, Evans A G. On the toughness of brittle materials Reinforced with a Ductile Phase. *Acta Metall*, 1988, 36(4): 945~953
- 117 Berns H, Melander A, Weichert D, Asnafi N, Broeckmann C, Gross-Weege A. A new material for cold forging tool. *Comput Mat Sci*, 1998, 11: 166~180
- 118 Holmes J W, Chermant Jr J L. Creep behaviour of fiber-reinforced ceramic matrix composites. In: Proc 6th European Conf Composite Materials, Bordeaux, 1993
- 119 Diani J M, Sabar H, Berveiller M. Micromechanical modelling of the transformation induced plasticity (TRIP) phenomenon in steels. *Int J Eng Sci*, 1955, 33: 1921~1934
- 120 Fischer F D, Sun Q P, Tanaka K. Transformation-induced plasticity (TRIP). *Appl Mech Rev*, 1996, 49: 317~364
- 121 Reisner G, Werner E A, Fischer F D. Micromechanical modeling of martensitic transformation in random microstructures. *Int J Solids Struct*, 1998, 35: 2457~2473
- 122 Levitas V I, Idesman A V, Stein E. Finite element simulation of martensitic phase transitions in elastoplastic materials. *Int J Solids Struct*, 1998, 35(9-10): 855~887
- 123 Fischmeister H F, Exner H E, Pöschel M H, Kohlhoff S, Gumbsch P, Schmauder S, Sigl L, Spiegler R. Modelling fracture processes in metals and composites. *Zeitschrift f Metallkunde*, 1989, 80(12): 839~849
- 124 McHugh P E, Asaro R J, Shih C F. Computational modeling of metal matrix composite materials. *Acta Metall Mat*, 1993, 41(5): 1461~1476(Part I); 41(5): 1477~1488(Part II); 41(5): 1489~1499(Part III)

(中国科学院力学研究所 LNM 陈少华 译自 Appl Mech Rev, 2001, 54(1): 49~68 魏悦广 校)

CONTINUUM MESOMECHANICAL FINITE ELEMENT MODELING IN MATERIALS DEVELOPMENT: A STATE-OF-THE-ART REVIEW

Leon L Mishnaevsky Jr Siegfried Schmauder

Staatliche Materialprüfungsanstalt(MPA), University of Stuttgart, 70569 Stuttgart, Germany

Abstract Advanced finite element techniques for the simulation of materials behavior under mechanical loading are reviewed. Advantages, limitations and perspectives of different approaches are analyzed for the simulation of deformation, damage and fracture of materials taking into account their micro- and mesostructure. Development of simulation methods for different aspects of materials behavior (such as the unit cell approach, real structure simulation, cohesive zone model, etc) is described including the simple versions of the methods as well as the advanced, highly efficient models. Possibilities of using the finite element method in the development of new materials are analyzed. This review article contains 131 references.

Keywords mesomechanics, finite element method