

W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料细观胞元重构

张云峰, 罗兴柏, 施冬梅, 刘国庆, 张玉令

(陆军工程大学 河北 石家庄 050000)

摘要: 采用两点概率函数提取 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料的统计特征并重构代表体积单元。结果显示, 两点概率函数可以良好的描述复合材料的微细观几何结构特征, 并给出了材料呈宏观各向同性的理论依据; 获得的代表体积单元与原材料图像拥有相同的几何特征和仿真分析结论, 胞元尺寸仅为原材料 SEM 图像的 2.2%, 可有效提高有限元仿真的效率。该研究为 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料的研究提供了途径。

关键词: W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料; 细观力学; 代表体积单元; 重构

中图分类号: TB331

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2019)01-0137-06

非晶态合金是指内部结构中原子呈长程无序排列的合金^[1]。Zr 基非晶合金具有易成形、高强度、高硬度、低杨氏模量、高弹性极限、断裂韧性高等一系列优异的物理力学性能, 因而得到广泛的研究和应用^[2,3]。但是, 非晶合金在变形过程中生成高度集中的局部剪切带, 导致材料宏观上没有塑性变形, 限制了其作为结构材料的应用^[4,5]。研究表明, 通过引入第二相形成复合材料, 可以阻止主剪切带的扩展并诱导生成多剪切带, 有效地提高非晶合金的塑性^[6,7]。W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料具有三维连通结构, 两相在三维上互相约束强化, 为各向同性材料, 力学性能优异, 受到广泛关注^[8,9]。

根据现代材料科学的基本理论, 复合材料的宏观变形、力学响应及其破损机理与微细观组成、结构密切相关。由于实验手段及条件的限制, 当前对于 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料的研究主要集中于其基础力学性能及破损形貌上, 对其变形、损伤的动态过程研究较少^[10,11]。细观力学仿真作为一种补充研究手段, 可以方便的研究复合材料受载荷后的动态过程, 在复合固体推进剂^[12]、混凝土^[13]等领域应用广泛。Zhang^[14]首次将该方法引入到非晶复合材料研究中来, 采用 SEM 图像进行网格划分, 利用有限元法初步研究了准静态压缩下材料的变形特征和 W 相体积分数对材料力学性能的影响等, 仿真结果与实验结果一致性较好。但是, 直接采用图像处理方法构建材料物理模型的仿真手法存在材料胞元代表性无法验证、胞元尺寸选择随意性过大、网格单元过多影响仿真效率等问题, 有待进一步解决。

本实验研究基于两点概率的 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料胞元重构方法。首先采用两点概率法提取材料的统计特征, 并从几何特征上提供材料各向同性的理论根据, 研究代表体积单元 (RVE) 的最适尺寸; 其次研究基于模拟退火算法的复合材料 RVE 重构算法, 提出参数选择的原则; 最后对比分析了 RVE 与原复合材料的统计特征和准静态变形特征仿真结果, 证明该重构方法的代表性和有效性。

1 微细观结构的统计特征

为重构复合材料代表体积单元, 需首先提取材料二维图像统计特征。Torquato^[15]指出, n 点概率函数能很好的表征复合材料微细观结构的统计特征, 材料的热效应、力学性能、电磁效应均取决于一组表征复合材料微细观结构的关联函数。对于两相复合材料来说, 采用两点概率函数表征其微细观结构已经足够。

1.1 两点概率函数

考虑 d 维欧氏空间中的两相复合材料, 假设两相的体积分数分别为 $\phi_i (i=1, 2)$, 为提取复合材料的几何特征, 定义指示函数 $I^{(i)}(x)$:

$$I^{(i)}(x) = \begin{cases} 1, & x \in V_i \\ 0, & x \notin V_i \end{cases} \quad (1)$$

式中, V_i 为第 i 相占据的空间, x 为细观结构中随机位置的点。则该二元空间的 n 点概率函数可以表示为:

$$S_n^{(i_1, i_2, \dots, i_n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) = \overline{I^{(i_1)}(x_1) I^{(i_2)}(x_2) \cdots I^{(i_n)}(x_n)} \quad (2)$$

式中, $\overline{I^{(i)}(x)}$ 表示样本空间中独立样本的总体平均。对统计均匀性材料而言, n 点概率函数具有绝对位置

收稿日期: 2018-01-09

作者简介: 张云峰, 男, 1990 年生, 博士生, 陆军工程大学, 河北 石家庄 050000, E-mail: 1193954881@qq.com

和相对位置的等效性, 即:

$$S_n^{(i_1, i_2, \dots, i_n)}(x_1, x_2, \dots, x_n) = S_n^{(i_1, i_2, \dots, i_n)}(x_{12}, x_{13}, \dots, x_{1n}) \quad (3)$$

对于 $n \geq 1$, $x_{ij} = x_i - x_j$, 此时 n 点概率函数与坐标系的选取无关。一点概率函数为常数, 即相 i 的体积分数 ϕ_i , 内涵为介质中任取一点 x 均属于相 i 的概率:

$$S_1^{(i)} = \overline{I^{(i)}(x)} = \phi_i \quad (4)$$

统计各向同性材料的特征函数表示与坐标系旋转无关, 即当 $n \leq d$ 时, n 点概率函数仅决定于距离 $x_{ij} = |x_i - x_j| (1 \leq i < j \leq n)$ 。

两点概率函数 $S_2^{(i_1, i_2)}(x_1, x_2)$ 定义为:

$$S_2^{(i_1, i_2)}(x_1, x_2) = \overline{I^{(i_1)}(x_1)I^{(i_2)}(x_2)} \quad (5)$$

它表示点 x_1, x_2 分别位于相 i_1, i_2 的概率, 可简称为 $S_{i_1 i_2}$ 。对具有统计均匀性与统计各向同性的材料:

$$S_2^{(i_1, i_2)}(x_1, x_2) = S_2^{(i_1, i_2)}(r) \quad (6)$$

其中 $r = |x_{12}| = |x_1 - x_2|$, 即两点概率函数可由两点间的距离求得。对于两相材料, 两点概率函数满足如下关系式:

$$\phi_1 = \phi_2 \quad (7)$$

$$S_{11} - \phi_1^2 = S_{22} - \phi_2^2 \quad (8)$$

$$S_{11} + S_{12} + S_{21} + S_{22} = 1 \quad (9)$$

由式(7~9)可知, 对两相复合材料特征提取与重构, 只需考虑 S_{11} (或 S_{12} 、 S_{21} 、 S_{22}) 即可。

两点概率函数有如下性质:

$$\lim_{r \rightarrow 0} S_{11} = \phi_1 \quad (10)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} S_{11} = \phi_1^2 \quad (11)$$

式(10)的物理意义为距离极近的两点概率收敛于其一点概率即体积分数, 式(11)的物理意义为距离极远的两点分别位于相 1 的概率相互独立, 其两点概率为 ϕ_1^2 。

1.2 几何特征提取

根据式(6), 一般可采用 Monte-Carlo 法, 重复随机选择距离为 r 的两个点, 并求得材料与 r 相关的两点概率函数, 但对于尺寸较小的位图, 采用遍历法更为精确方便。本研究采取遍历标靶法提取材料的几何特征, 标靶法的示意图如图 1 所示, 假设材料为黑(b)白(w)两相复合材料, 设 i 为材料位图中的任意黑色像素, 标靶的步长为 dr (例如取 $dr=1$ pixel), 数列 $B(r)$ 用以储存所有相互距离为 r 的相应像素对的数量。以求两点概率 S_{bb} 为例, 遍历标靶法步骤如下:

(1) 得到所有与 i 距离在 r 到 $r+dr$ 之间的黑色像素 j 的数量, 并将其存入长度为 n 数列 $B(r)$ 的相应位置, n 为标靶的半径;

(2) 令 $r=r+dr$, 并计算黑色像素对的数目, 储存在 $B(r)$ 相应位置, 直到 $r=n$;

(3) 将 i 遍历所有黑色像素并累加得到最终的数列 $B(r)$;

(4) 同理, 可得到记录距离为 r 的所有像素对数目的数列 $S(r)$, 则

$$S_{bb}(r) = B(r)/S(r) \quad (12)$$

图 2 为 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料的细观结构, 图 2a 为原始 SEM 图像, 图 2b 为经图像处理得到的二值图, 其中黑色相代表 Zr 基非晶合金, 白色相代表 W 骨架, W 骨架的体积分数为 76.48%。

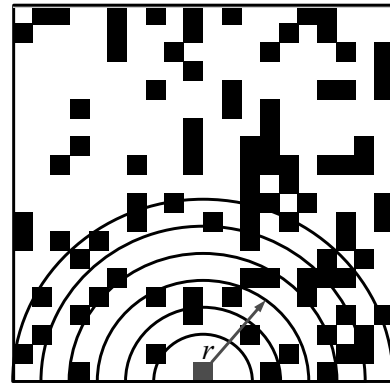


图 1 标靶法示意图

Fig.1 Sketch map of sampling template method

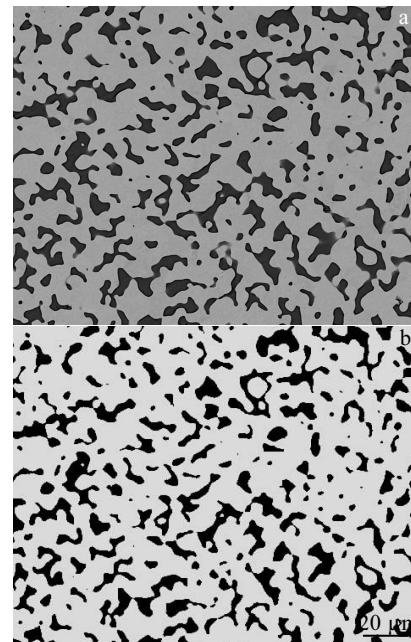


图 2 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料细观结构

Fig.2 Meso-structure of Zr-based metallic glass reinforced porous W matrix composite: (a) SEM image of the material and (b) result of picture processing

图 3 为图 2b 所示位图的两点概率, 图 3a 为各方向上两点概率曲面, x 、 y 为横纵坐标, z 轴为两点概率 S_{bb} , 该材料各方向上的两点概率均方差小于 1%, 即从几何特征角度讲, W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料为各向同性材料, 也与材料宏观性能各向同性的实验结果相吻合, 材料的统计均匀性假设较好证明, 在此不赘述。图 3b 为材料的两点概率 S_{bb} , 可以看出, 该曲线满足式(10)、(11), 即在 $r=0$ 时, $S_{bb}=\phi_b$, 随着 r 变大, 曲线逐渐收敛于 ϕ_b^2 。

2 随机优化过程

材料细观模型重构的本质是随机优化过程, 对于统计均匀的各向同性材料, 若边长为 N 的 d 维重构, 则状态参量数目为 $d \cdot N^d \phi_1$, 其状态空间为复合材料全部可能构型, 因此进化速度缓慢的并行优化算法并不适用, 本研究采用模拟退火过程重构材料的代表体积单元。

2.1 模拟退火过程

模拟退火算法 (Simulated annealing algorithm, SA) 是依据统计物理学原理, 模仿固体退火过程的随机优化算法, 它的核心为 Metropolis 算法。Metropolis 算法产生一个马尔可夫链, 它的转移概率确实收敛到一个独立平稳的 Gibbs 分布, 当温度 $T \rightarrow 0$ 时, 系统能量将收敛

到全局极小点。Metropolis 算法如式(13)所示:

$$p = \begin{cases} 1, & \Delta E < 0 \\ e^{(-\Delta E/T)}, & \Delta E \geq 0 \end{cases} \quad (13)$$

其中, p 为系统在该状态下的接受概率, $\Delta E = E_{\text{new}} - E_{\text{old}}$ 为系统的能量差, T 为当前温度, 若 ΔE 为负, 则新状态系统能量更低, 该次转移被接受; 若 ΔE 为正, 则新状态以概率 $e^{(-\Delta E/T)}$ 被接受。对于本研究, 系统能量 E 定义为重构模型与真实材料的两点概率函数之差见式(14)。

$$E = \sum_i [S_{bb}(r_i) - \hat{S}_2(r_i)]^2 \quad (14)$$

在实际应用中, 为避免退火进度过于缓慢, 需设置退火进度表。退火进度表的关键内容为: 初始温度 T_{init} , 它应该足够高以使算法可以跳出局部最小值; 温差系数 α , 温度降定义为式(13), 通常取 0.75~0.95。

$$T_k = \alpha T_{k-1} \quad (15)$$

RVE 重构时, 每次迭代随机交换分属不同相的一个像素的位置, 并重新计算该状态的系统能量, 并按照式(13)~(15)进行退火过程。

2.2 系统能量计算

模拟退火过程中, 每次迭代均需重新计算材料的两点概率函数, 由式(1)、(5)、(6), 求两点概率函数的计算复杂度为 $O(N^2)$, 该过程影响整系统的效率。

设某次迭代点 x_1 、 x_2 交换位置, y 为除 x_1 、 x_2 外的任一点, 对于各向同性材料, 由式(6)可得出式(16)、(17):

$$S_2^{(i_1, i_2)}(x_1, x_2) = S_2^{(i_1, i_2)}(x_2, x_1) \quad (16)$$

$$S_2^{(i_1, i_2)}(x_1, y) = S_2^{(i_1, i_2)}(y, x_1) \quad (17)$$

x_1 、 x_2 交换位置后, 仅影响两点概率中与 x_1 、 x_2 相关的部分, 其余点对两点概率的贡献不变。假设交换前 x_1 为黑色相, 交换后 x_2 为黑色相。数列 $B_1(r)$ 记录交换前 x_1 点在不同距离上相对于其余同相点点对的数目, 数列 $B_2(r)$ 记录交换后 x_2 点在不同距离上相对于其余同相点点对的数目, 根据式(10)、(14)、(15), 一次迭代后两点概率可由式(18)得到。

$$S_{bb}(r) = [B(r) - 2B_1(r) + 2B_2(r)] / S(r) \quad (18)$$

由式(18), 像素互换后两点概率的计算复杂度变为 $O(N)$, 极大地简化了计算过程, 提高了计算效率。

3 仿真实验验证

3.1 胞元重构

利用模拟退火过程重构材料细观模型, T_{init} 的选择应使该温度下的接受概率大于 50%, 每个温度下的至少发生 N 次迭代。Torquato^[15]认为, 若所选材料区域的两点概率接近渐近线极限, 即满足式(11), 则该

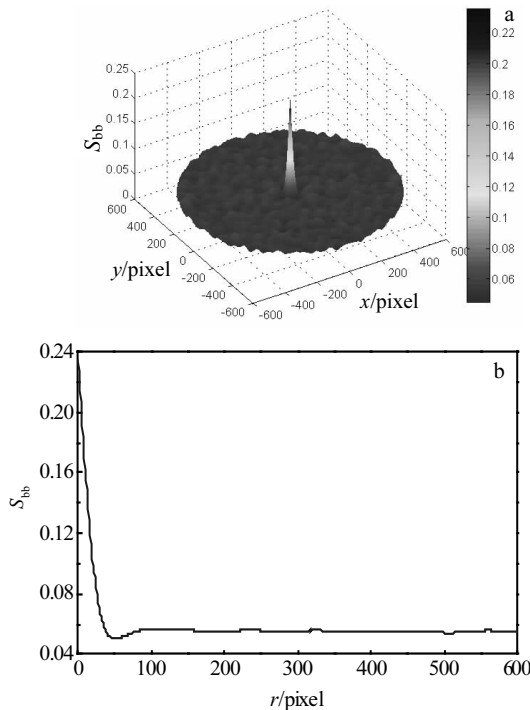


图 3 复合材料的两点概率函数

Fig.3 Two-point probability function of composites: (a) two-point probability function surface in all directions and (b) two-point probability function curve of the material

区域尺寸可作为统计性代表体积单元 (RVE) 的尺寸范围。图 4a 为 S_{bb} 与 ϕ_1^2 的对比, 可以看到当 $r \geq 100$ 时, S_{bb} 趋近于 ϕ_1^2 ; 图 4b 为 S_{bb} 与 ϕ_1^2 两者之差, 当 $r \geq 100$ 时, S_{bb} 与 ϕ_1^2 的均方差在 1.5×10^{-3} 以内, 因此选择 RVE 的尺寸 N 为 200。

选择参数 $T_{init}=100$, $\alpha=0.85$, 终止条件为: (1) $\Delta E \leq 10^{-6}$; (2) 连续 3 次迭代 ΔE 不下降; (3) 迭代次数大于 5×10^5 , 三者满足一个条件即算法终止。经 20 次重复试验, 条件 (1) 终止的频率为 0.9, 表明算法具有较强的稳定性, 无条件 (2) 终止, 证明算法具有收敛性, 所能达到的最小值远小于 $\Delta E = 10^{-6}$ 。W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料的 RVE 重构结果如图 5 所示, 材料重构时添加了周期性边界条件, 图 5a~图 5d 分别为 4 次重构得到的 4 个子胞元(RVE), 由于是根据材料几何特征随机生成, 4 张子图的细观形貌与图 2 十分相近但不完全相同。

图 6 为原复合材料两点概率曲线与 4 个重构胞元的两点概率曲线对比图, 可以看到, 4 个重构胞元与原材料两点概率曲线基本重合, 误差小于 10^{-6} , 表明重构胞元的几何特征与原复合材料十分相近。当 r 接近 100 时, 子胞元 2 的两点概率与原材料偏差较大, 原因是该子胞元生成时未达到能量阈值即停止。

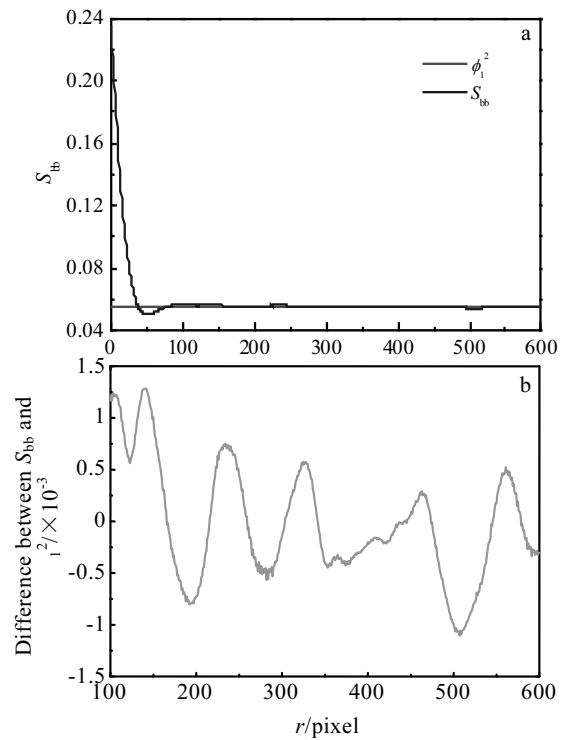


图 4 RVE 尺寸选择: S_{bb} 与 ϕ_1^2 曲线及 S_{bb} 与 ϕ_1^2 之差
Fig.4 Size selection of RVE: (a) curves of S_{bb} and ϕ_1^2 and (b) the difference between S_{bb} and ϕ_1^2

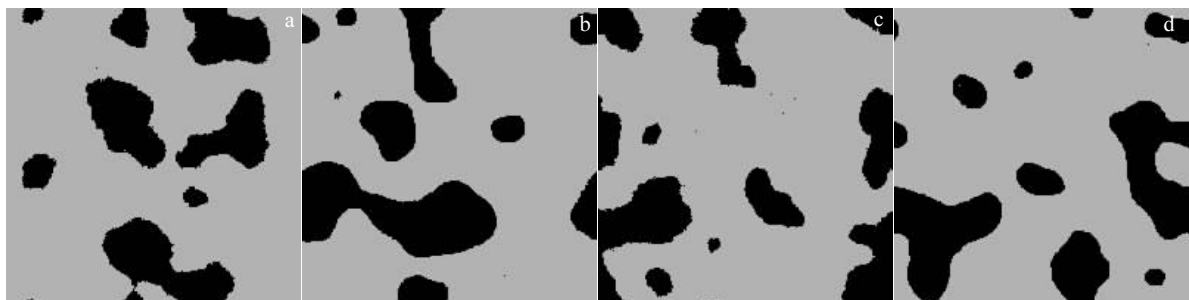


图 5 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料重构

Fig.5 Reconstruction of Zr-based metallic glass reinforced porous W matrix composite: (a) child cell 1, (b) child cell 2, (c) child cell 3, and (d) child cell 4

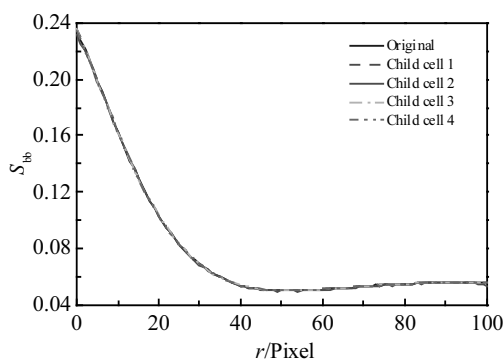


图 6 重构 RVE 两点概率对比

Fig.6 Comparison of two-point probability function of RVE

3.2 材料应力特征仿真分析

将材料 RVE 导入有限元分析(FEM)软件中并按像素划分网格, 进行准静态压缩条件下仿真研究。图 7 为 4 个子胞元内部的 Von Mises 应力分布云图, 当外加应力为 1175 MPa 时, 非晶相承载的应力低于 W 相, W 相的应力主要集中在两相界面附近及尖端处, 在 W 相位于两个较为靠近的非晶相尖端位置时, von Mises 应力值最大, 为应力集中区域。这是由于两相弹性应变不匹配在两相界面结合处加重所致。4 个子胞元的应力分布均与上述特征相符, 与文献[14]所得应力分布特征一致。

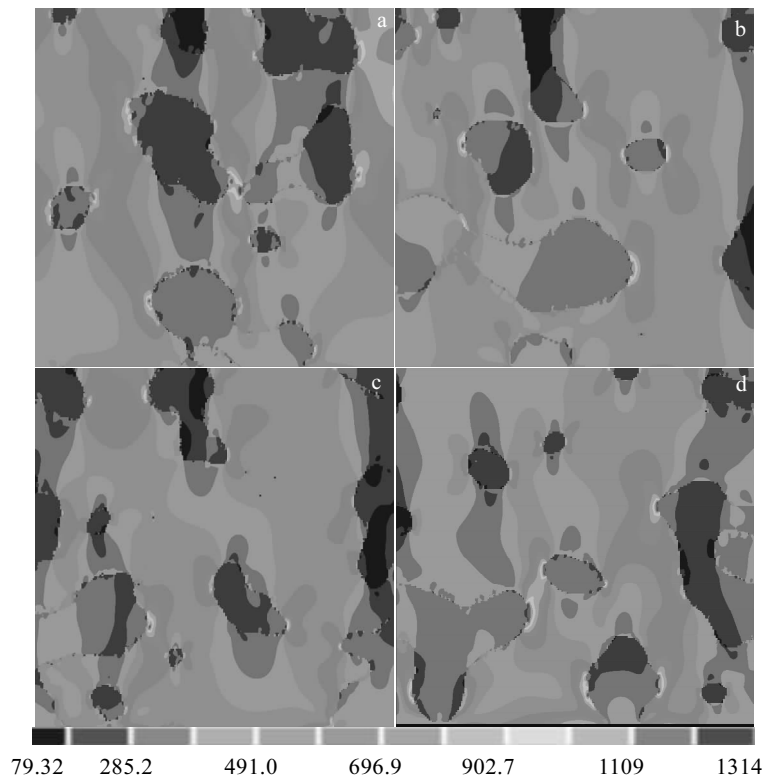


图 7 材料 Von Mises 应力分布状态

Fig.7 Von Mises stress distribution of materials: (a) child cell 1, (b) child cell 2, (c) child cell 3, and (d) child cell 4

材料 SEM 图像的尺寸为 1200×1500 像素, 而重构胞元尺寸为 200×200 像素, 仅为原图像的 2.2%, 仿真时物理模型的网格数目大大减小, 在保障仿真结果的前提下, 可以有效提高仿真效率。

4 结论

1) 复合材料的宏观性能由其微观结构决定, 两点概率函数能很好地描述 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料的几何特征; 其两点概率函数在各个方向上的标准差小于 1%, 表明该材料在几何特征上为各向同性材料, 该结论也与宏观实验结果相吻合。

2) 采用基于模拟退火算法的材料细观模型重构方法, 获得了材料的 RVE 模型。与文献[14]采用的建模方法相比: RVE 模型与原材料的几何特征与仿真结果基本相同, 但物理模型尺寸仅为 2.2%, 可有效提高仿真效率。且重构胞元的尺寸、代表性有理论保证, 避免了胞元选取的随意性。

3) 该方法不仅适用于 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料, 也可用于多孔材料、颗粒增强复合材料等的细观模型重构, 具有普遍适用性。通过调节退火进度表及算法结束阈值, 可以控制生成 RVE 的质量, 进一步提高 RVE 与原材料两点概率函数的相似性。

参考文献 References

- [1] Hui Xidong(惠希东), Chen Guoliang(陈国良). *Bulk Amorphous Alloy*(块体非晶合金)[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 1
- [2] Wang G Y, Liaw P K. *Intermetallics*[J], 2009, 17: 579
- [3] Zhang X Q, Ma L L, Xue Y F et al. *Journal of Non-Crystalline Solids*[J], 2016, 436: 9
- [4] Dai L H, Bai Y L. *International Journal of Impact Engineering*[J], 2008, 35: 704
- [5] Wang J G, Pan Y, Song S X et al. *Materials Science & Engineering A*[J], 2016, 615: 321
- [6] Lee Kyuhong, Lee Sang-Bok, Lee Sang-Kwan et al. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2008, 39A(6): 1319
- [7] Zhang Bo, Fu Huameng, Sha Pengfeng et al. *Materials Science & Engineering A*[J], 2013, 566: 16
- [8] Xue Y F, Cai H N, Wang L et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2007, 445-446: 275
- [9] Zhang X Q, Wang L, Xue Y F et al. *Materials Science and Engineering: A*[J], 2013, 561: 152
- [10] Xue Yunfei, Wang Lu, Cheng Huanwu et al. *J Mater Sci Technol*[J], 2010, 26(10): 908

- [11] Xue Y F, Wang L, Cai H N *et al.* *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2011, 42A(11): 3521
- [12] Zhang J W, Zhi S J, Sun B. *Science China, Technological Sciences*[J], 2013, 56(12): 3055
- [13] Zhang Chuhan(张楚汉), Tang Xinwei(唐欣薇), Zhou Yuande(周元德) *et al.* *Journal of Hydroelectric Engineering*(水力发电学报)[J], 2015, 34(12): 1
- [14] Zhang X Q, Xue Y F, Wang L *et al.* *Materials Science & Engineering A*[J], 2015, 643: 55
- [15] Torquato S. *International Journal of Solids and Structures* [J], 1998, 35(19): 2385

Reconstruction of Meso-cells of Zr-based Metallic Glass Reinforced Porous W Matrix Composite

Zhang Yunfeng, Luo Xingbai, Shi Dongmei, Liu Guoqing, Zhang Yuling
(Army Engineering University, Shijiazhuang 050000, China)

Abstract: The statistical characteristics of Zr-based metallic glass reinforced porous W matrix composite were extracted using two-point probability functions. And representative volume elements (RVE) of the composite were reconstructed. The results show that the micro-structural geometric structure characteristics can be described satisfactorily and the theoretical foundation of macro isotropy of materials is approved. Though the RVEs have the same geometric characteristics and simulational analysis results with original composites, RVEs are only 2.2% in the size of original SEM picture, which can increase the efficiency of finite element analysis. A strong tool is developed for the research of Zr-based metallic glass reinforced porous W matrix composite by this work.

Key words: Zr-based metallic glass reinforced porous W matrix composite; mesomechanics; RVE; reconstruction

Corresponding author: Zhang Yunfeng, Ph. D., Army Engineering University, Shijiazhuang 050000, P. R. China, E-mail: 1193954881@qq.com