

W-Ni-Fe 合金静动态力学性能及数值模拟研究¹⁾

宋卫东^{*,2)} 刘海燕[†] 宁建国^{*}

^{*}(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

[†](北京理工大学宇航学院, 北京 100081)

摘要 采用 MTS 材料实验机和旋转盘式间接杆-杆型冲击拉伸试验装置对质量百分数为 91% 的钨合金材料力学性能进行了研究. 基于试验结果, 建立了具有钨合金典型细观结构的单胞有限元模型, 采用不动点迭代方法给出了该有限元模型的真实位移条件, 分析了不同颗粒度形状以及钨颗粒体积含量等细观参量对钨合金材料在不同载荷作用下力学性能的影响, 给出了钨合金材料在不同载荷作用下的应力-应变曲线, 并与试验结果进行了对比, 二者具有较好的一致性. 通过数值模拟发现不同颗粒度的钨合金材料均为应变率敏感材料; 钨颗粒长径比对材料力学性能的影响不大; 随着钨颗粒质量分数的增加, 钨合金材料的屈服应力有所提高.

关键词 钨合金, 动态力学性能, 数值模拟, 不动点迭代法

中图分类号: O347.3 文献标识码: A 文章编号: 0459-1879(2010)06-1149-07

引言

钨合金具有熔点高、高温条件下强度优良、导热性好、热膨胀系数小、吸收射线能力强以及抗辐射等良好的特性, 在国防军工、航空航天、电子工业、能源、冶金、机械加工工业和核工业中都有着广泛的应用^[1]. 钨合金的两相复合结构决定了其宏观的变形和破坏机理与材料的细观结构密切相关, 因此研究钨合金受载时细观结构的变形过程, 从而建立微结构和宏观力学行为之间的关系, 对后继从材料制备的角度提高钨合金力学性能有现实的指导意义, 对钨合金材料的优化和力学性能的改进是十分必要的^[2-3]. Woodward 等^[4]利用 Kolsky 杆研究了钨合金材料在不同应变率条件下 (10^3s^{-1}) 的动态力学性能, 表明材料的流动应力随着应变率的增加而增加. Cimpoeru 等^[5]在 Woodward 等研究的基础上将应变率的范围扩展到 $1.4 \times 10^4\text{s}^{-1}$. 史洪刚等^[6]依据等强度思想, 研究了变形态钨合金微观组织的开裂问题, 即钨合金在高载荷作用下, 基体和钨颗粒同时启裂, 使之处于等强度状态, 从而达到最佳的强韧性配合.

由于钨合金的熔点高, 硬度高, 导磁性差, 所以加工难度大, 加工费用昂贵, 材料实验成本过高.

这就要求在有限的实验基础上, 借助于仿真手段对材料实验加以完善. 这样可以节约大量的实验成本, 有效地扩展实验数据, 丰富实验中所不能观察的现象, 为下一步实验、理论分析提供强有力的支撑. 准确有效地预测复合材料的力学等性能, 包括其强度、刚度、延展性及热膨胀系数等, 对于材料的设计是非常必要的. 为了揭示材料的细观特征对其宏观性能的影响, 许多科研工作者从数值仿真角度出发, 做了大量的工作, 解决了一些理论与实际问题^[7-8]. Böhm 等^[9]采用多夹杂单胞方法研究了随机取向短纤维增强金属基复合材料弹性和弹塑性行为. 同时探讨了增强相类型和形状在弹性和弹塑性范围内的影响, 采用 Weibull 分布函数来评估纤维或颗粒断裂的可能性. Eckschlager 等^[10]利用立方体单胞夹杂增强颗粒模型研究了增强颗粒的破碎失效行为及颗粒分布对 PMMCs 的力学行为和起始破坏的影响. Xue 等^[11]利用应变梯度塑性理论结合有限元单胞模型进行了研究, 发现随着颗粒直径的递减, 复合材料显示出越来越强的尺寸效应. 唐春安等^[12]研究了高强度圆形颗粒增强复合材料在拉伸载荷作用下变形、损伤直至失稳破坏的全过程, 再现了复合材料在变形、破坏过程中的裂纹萌生、扩展规律以及颗粒间的相互作用.

2009-07-22 收到第 1 稿, 2010-03-01 收到修改稿.

1) 国家自然科学基金 (91016013, 11032002, 10602008), 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室自主研究课题 (ZDKT08-02, ZDKT10-03a) 和国家重点基础研究发展计划 (2010CB832700) 项目资助.

2) E-mail: swdgh@bit.edu.cn

国内外许多学者对钨合金材料进行了数值模拟研究,多是在胞元上人为规定边界条件进行计算,不真实的边界条件不可避免地使计算结果存在一定误差.本文在实验的基础上,假设钨合金的微结构呈周期性分布,应用泛函分析中的不动点迭代方法求解卸载复合材料中胞元的边界条件,进而准确地求解出复合材料的等效力学性能.

1 钨合金力学性能的实验研究

1.1 准静态拉伸实验

准静态单向拉伸实验是在中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室的 MTS810 液压伺服材料试验机上完成的,实验所用材料为钨合金材料,其成份及质量比为 $m_W : m_{Ni} : m_{Fe} = 91 : 6.3 : 2.7$. 它是由粒度为 $30 \sim 40 \mu m$ 的细化预合金粉末经固相烧结得到的钨颗粒度约为 $20 \mu m$ 的细观粒状复合材料. 将钨合金材料棒材经线切割加工成如图 1 所示的试件,对材料试件进行多次准静态拉伸实验,并对实验结果取均值,得到钨合金材料的基本静态力学性能参数,其中弹性模量 320 GPa , 延伸率 26.8% , 强度极限 954.7 MPa .

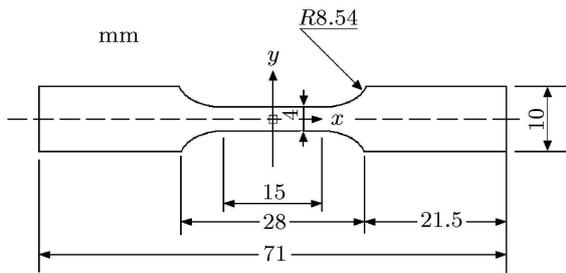


图 1 钨合金材料准静态单轴拉伸试件

Fig.1 Specimen of tungsten alloys under quasi-static loadings

1.2 动态拉伸实验

钨合金材料的动态拉伸实验是在旋转盘式间接杆-杆型冲击拉伸装置上进行的,分别在应变率 200 s^{-1} 和 500 s^{-1} 下对细化钨合金材料的动态力学性能进行了实验研究. 在实验中,材料试件均设计成扁平的哑铃状,如图 2 所示. 钨合金材料的动态拉伸实验是在常温下进行的,每种应变率下的实验均重复 4 次,对实验结果取平均值,得到不同应变率条件下钨合金材料的动态力学性能参数,如表 1 所示.

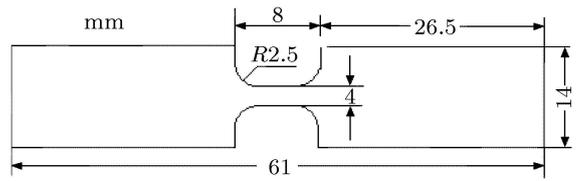


图 2 冲击拉伸实验试件

Fig.2 Specimen of tungsten alloys under dynamic loadings

表 1 钨合金材料的动态力学性能参数

Table 1 Dynamic mechanical parameters of tungsten alloys

Strain rate/ s^{-1}	200	500
Yield limit/GPa	1.13	1.201
Strength limit/GPa	1.208	1.235
Failure strain/%	4.97	4.2
Elastic modulus /GPa	366	366

2 钨合金力学性能的数值模拟研究

2.1 不动点迭代法

对于给定的复合材料,当基体和颗粒相的材料性质,颗粒的大小、形状、分布、体积百分比等确定之后,求解复合材料宏观等效力学性能参数的问题可以归结为求解泛函方程

$$\Phi(\xi_1, \xi_2, f, u, \xi) = 0 \tag{1}$$

的问题. 其中, ξ_1 为基体相的材料常数, ξ_2 为颗粒相的材料常数, f 为单胞的力边界条件, u 为单胞的位移边界条件, ξ 为宏观等效材料参数. 由巴拿赫不动点定理^[10]可知: 只要基于 $\Phi(\xi) = 0$ 找到一个初值 ξ_0 和一个压缩映射 T , 则存在且唯一存在不动点 ξ . ξ 即为方程 $\Phi(\xi) = 0$ 的解, 也就是复合材料的宏观等效力学性能参数.

2.2 有限元分析方法

假定钨颗粒为大小均匀的理想球形且严格按照密排六方结构分布,如图 3 所示. 根据模型的对称性,矩形 $ABCD$ 表征了结构的全部特征,因此选取 $ABCD$ 为钨合金材料的单胞模型. 首先,按照复合材料的零阶材料参数建立宏观均质模型(图 4),尺寸为 $15 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$,尺寸大小与实验试件的实际尺寸相吻合. 将模型划分为 934×444 个有限元网格,将其一边约束住 x 方向自由度,另一边施加均布拉力. 对上述宏观均质模型进行有限元分析,分析后可以获得每个单元的力、位移、应力、应变等时间

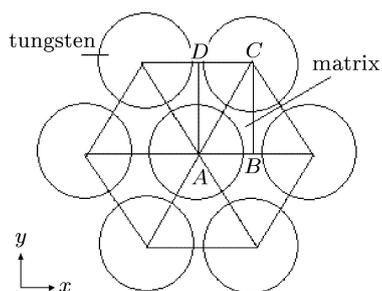


图 3 钨合金二维组织结构模型

Fig.3 2D microstructure model of tungsten alloys

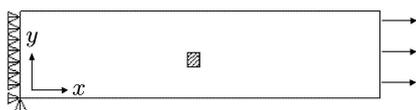


图 4 宏观均质模型示意图

Fig.4 Schematic of macro-homogeneous model

历程曲线。注意到该模型中每个单元的尺寸为 $16\mu\text{m} \times 9\mu\text{m}$, 由钨颗粒的粒度 ($5\mu\text{m}$) 和钨的质量百分比 (91%), 可计算出钨合金的单胞尺寸约为 $16\mu\text{m} \times 9\mu\text{m}$ 。选取均质模型中的 3×3 个单元 ($48\mu\text{m} \times 27\mu\text{m}$), 并取出其边界节点处的位移时间历程曲线, 然后, 按照基体的材料参数建立均质模型, 本文称之为宏-细观过渡模型。将模型划分 66×60 个有限元网格, 将从宏观模型中提取的位移值作为边界条件施加到宏-细观过渡模型的相应边界节点处, 进行有限元求解。过渡模型的选取在宏观均质模型的中心位置, 根据圣维南原理, 此时边界效应对其影响不大, 该过渡模型的力学响应可以反映材料的宏观力学性能。同样, 对上述过渡模型进行有限元分析后可以获得每个单元的力、位移、应力、应变等时间历程曲线。宏-细观过渡模型中的 3×3 个单元中的中心单元尺寸为 $16\mu\text{m} \times 9\mu\text{m}$, 刚好为单胞尺寸。取出其边界节点处的时间-位移曲线作为单胞分析的边界条件, 然后, 建立图 5 所示的单胞模型, 将上面取出的节点位移时间历程曲线作为边界条件施加到相应节点处, 将该单胞上的位移边界条件命名为 f 。求解单胞域内的边值问题, 根据式 (2) 和式 (3) 作 $\sigma_e - \varepsilon_e$ 曲线求等效力学性能参数 ξ_1 。

$$\sigma_e = \frac{1}{A} \int_A \sigma dA \quad (2)$$

$$\varepsilon_e = \frac{1}{A} \int_A \varepsilon dA \quad (3)$$

其中, σ 和 ε 分别代表单胞域内的应力和应变场, A 为单胞区域的面积。

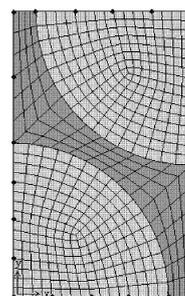


图 5 单胞模型

Fig.5 Unit cell model

再建立以 ξ_1 为材料参数的宏观均质模型 (图 4), 重复以上步骤。根据不动点迭代理论, 上述迭代过程将收敛于图 4 所示复合材料中单胞边界上各节点的真实位移值及复合材料的等效力学性能参数 ξ , 即如果对于第 $n+1$ 次迭代有 $\xi_{n+1} - \xi_n \leq \lambda$ (λ 为一小数), 则 ξ_n 即为复合材料的等效力学性能参数, 第 n 次迭代所得到的 $\sigma_e - \varepsilon_e$ 曲线即为复合材料的应力应变曲线。该种数值方法可以通过数值迭代过程, 给出单胞模型的真实位移边界条件, 从材料的细观结构出发获得材料的宏观力学响应, 而且可以有效地减少计算规模, 节约计算时间。

2.3 数值模拟结果与实验结果的对比

根据上述分析方法, 应用有限元软件 LS-DYNA 分析钨合金材料在应变率 10^{-4}s^{-1} (准静态), 200s^{-1} 和 500s^{-1} 下的力学响应情况, 3 种不同的加载条件由施加在模型上的位移边界条件来实现。钨颗粒和粘结相的材料模型均采用 LS-DYNA 提供的随动强化模型。表 2 给出了钨合金增强相和基体相的材料参数。

表 2 钨颗粒与基体相的力学性能参数

Table 2 Mechanical parameters of tungsten particle and matrix

Material	Tungsten	Matrix
density/($\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$)	19	15
elastic modulus/ GPa	410	200
Poisson's ratio/ ν	0.27	0.31
yield stress σ_s /MPa	800	300
strain-hardening modulus/GPa	0.5	0.15
failure strain	0.6	1.2

对钨合金材料在 3 种不同应变率条件下的力学响应情况进行数值模拟研究, 给出了钨合金复合材料在 10^{-4}s^{-1} , 200s^{-1} 和 500s^{-1} 下的应力-应变曲线, 并将计算结果与实验实测应力-应变曲线进行了对比。

从图 6(a) 中可以看出, 在准静态条件下, 数值计算所得的应力 - 应变曲线与实验实测应力 - 应变曲线吻合较好. 数值计算所得的弹性模量及屈服应力略大于实测结果, 这是因为计算中在达到破坏应力或破坏应变之前不考虑任何材料损伤及界面脱黏现象, 而在实验材料中这些现象是不可避免的. 在图 6(b) 和 6(c) 中, 可以观察到动态加载条件下, 在实测应力 - 应变曲线的弹性段, 应力随应变的增加而迅速地上升, 有一定的非线性, 这说明材料在

弹性变形阶段内部已有损伤出现. 而数值计算中材料在弹性段是理想的, 因此数值计算与实验所得应力 - 应变曲线在弹性段就有了较大差距. 由于动态加载条件下加载速度快, 决定了这一过程为绝热过程. 材料变形产生的热量来不及向外传递, 致使材料“软化”. 所以实验材料在发生屈服后没有表现出明显的应变硬化现象, 而在计算曲线中可以看到这一现象.

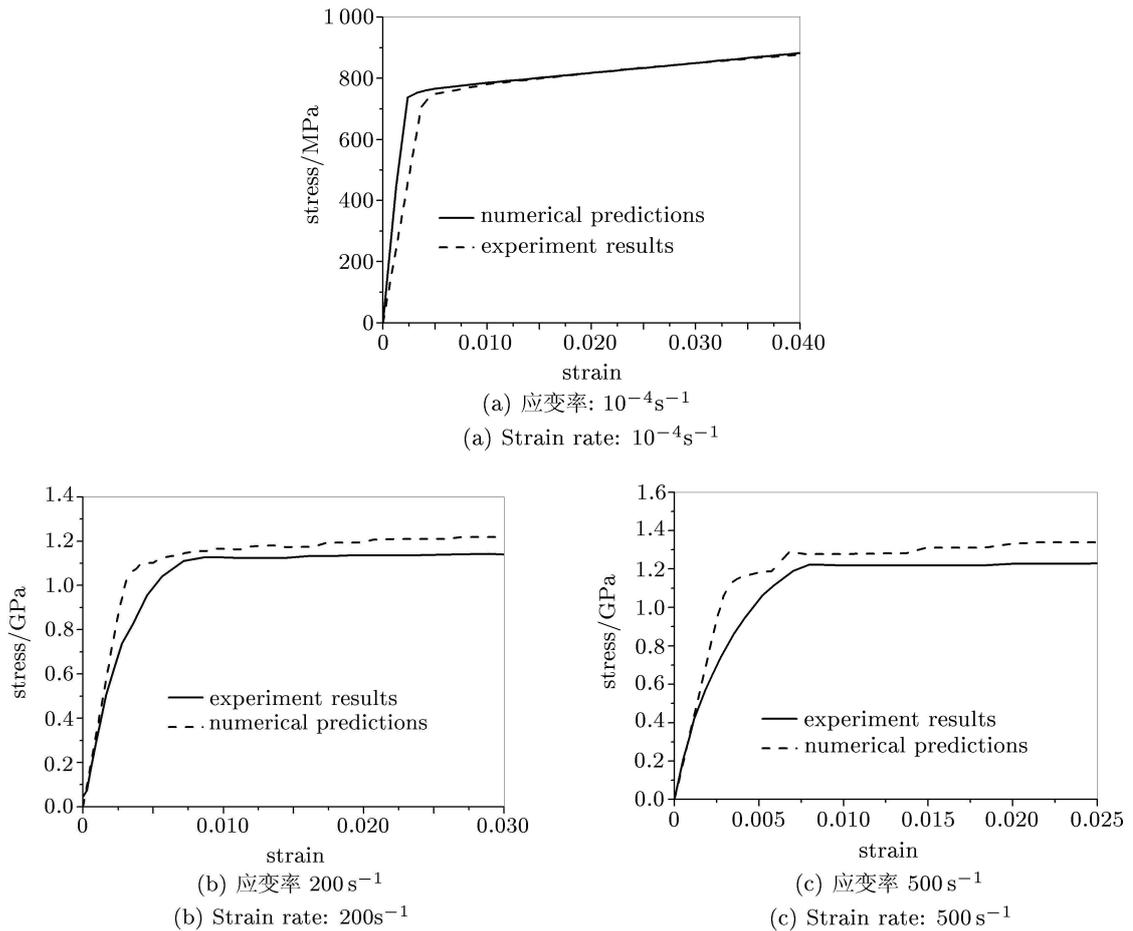


图 6 不同载荷作用下计算结果与实验结果的对比

Fig.6 Comparison of numerical predictions with experimental results under different tensile loadings

2.4 颗粒形状对复合材料力学性能的影响

在与实验结果相验证的基础上, 为了进一步研究钨颗粒形状对钨合金静动态力学性能的影响, 保持钨合金单胞尺寸为 $3\mu\text{m} \times 4\mu\text{m}$ 、钨的质量百分含量为 91% 不变, 分别计算钨颗粒长径比为 0.8, 1 和 1.1 的钨合金材料在应变率 10^{-4}s^{-1} (准静态), 200s^{-1} , 500s^{-1} 下的力学性能. 具有不同颗粒长径比的钨合金材料的单胞模型如图 7 所示.

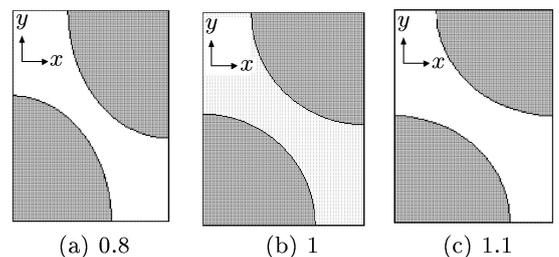


图 7 不同颗粒长径比钨合金材料的单胞模型

Fig.7 Unit cells for different particle aspect ratios

应用不动点迭代法对上述钨颗粒长径比为 0.8, 1 和 1.1 的钨合金材料在 3 种不同应变率条件下的静动态力学性能进行数值模拟研究, 给出了相应的应力 - 应变曲线.

图 8 给出了 3 种不同长径比钨合金材料在 10^{-4}s^{-1} , 200s^{-1} , 500s^{-1} 应变率条件下的宏观力学性能, 从图中可以看出, 钨颗粒长径比变化对钨合金材料弹性模量、屈服应力和强化模量的影响很小.

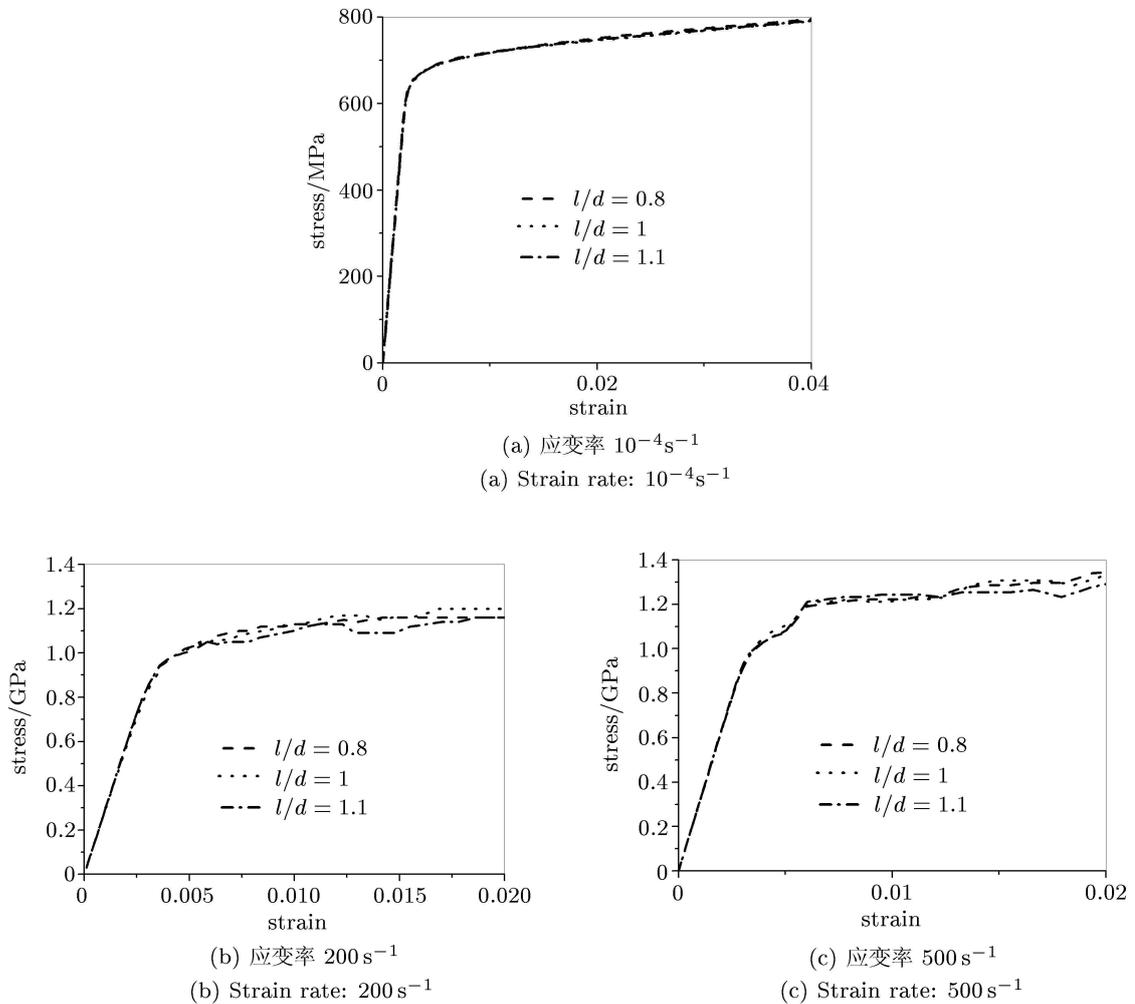


图 8 颗粒长径不同的钨合金材料的应力应变曲线

Fig.8 Stress-strain curves of tungsten alloys with different particle shape

2.5 颗粒质量分数对复合材料力学性能的影响

为研究钨颗粒质量分数对钨合金静动态力学性能的影响, 保持单胞尺寸为 $19\mu\text{m}\times 11\mu\text{m}$ 、钨颗粒形状为球形不变, 分别在应变率 10^{-4}s^{-1} (准静态), 200s^{-1} , 500s^{-1} 下计算钨质量百分含量为 85%, 88% 和 94% 的钨合金的静动态力学性能. 根据质量分数及单胞尺寸可计算上述 3 种材料的钨颗粒半径, 它们分别为 $10\mu\text{m}$, $10.2\mu\text{m}$ 和 $10.6\mu\text{m}$. 建立相应的单胞模型如图 9 所示.

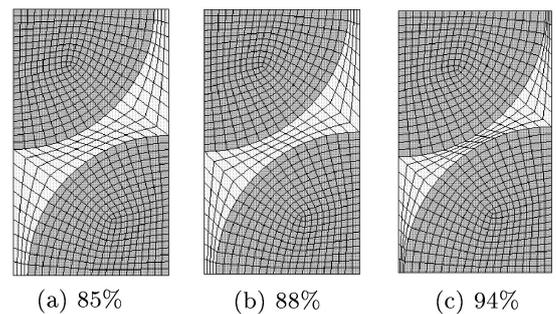


图 9 不同钨颗粒质量分数单胞模型

Fig.9 Unit cells for different tungsten mass fraction

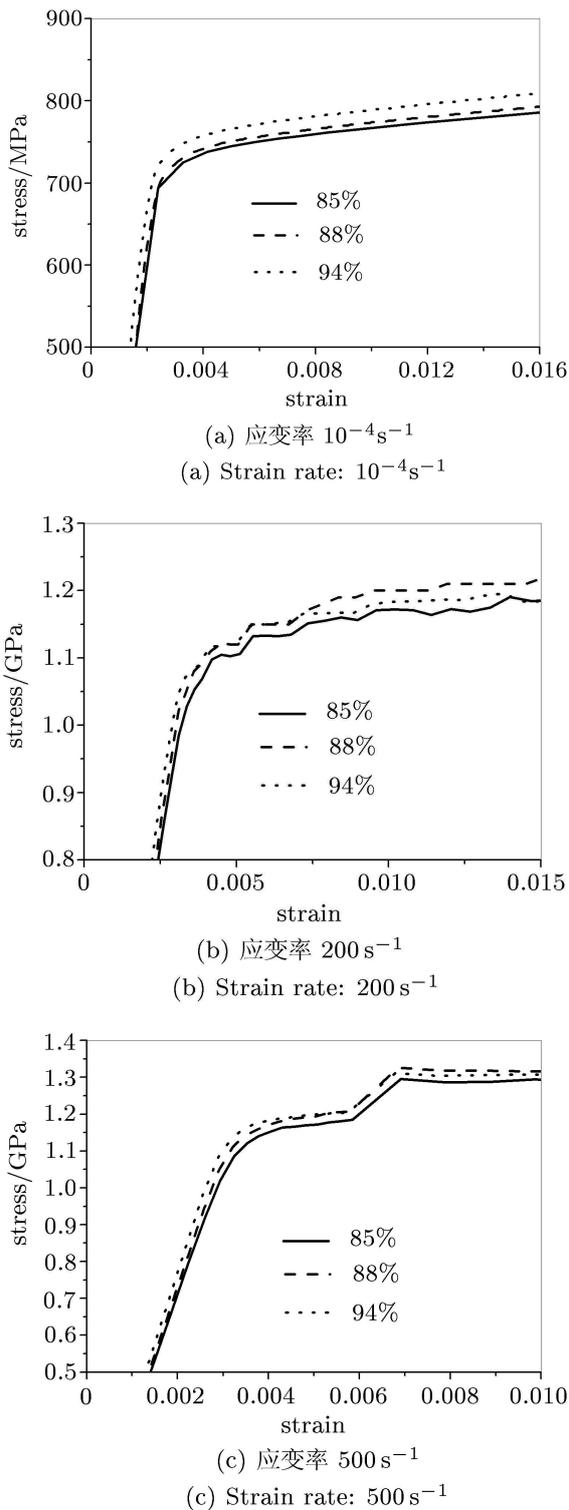


图 10 钨合金不同钨颗粒质量分数应力 - 应变曲线
Fig.10 Stress-strain curves of tungsten alloys with different mass fraction

由图 10(a) 可以看出, 钨颗粒质量分数对钨合金材料的静动态力学性能具有较大的影响, 如在准静态加载条件下质量分数为 85% 的屈服应力为

710MPa, 而质量分数为 94% 的屈服应力则增加到 740MPa. 在准静态加载条件下, 3 种材料的弹性模量几乎相同.

3 结 论

采用 MTS 材料实验机和旋转盘式间接杆 - 杆型冲击拉伸试验装置对颗粒度为 $20\mu\text{m}$ 的 91% 钨合金材料力学性能进行了研究. 在实验基础上, 建立了具有钨合金典型微观结构的单胞有限元模型, 采用不动点迭代法给出单胞有限元模型真实边界条件, 进而分析了单胞细观参数对钨合金材料宏观力学性能的影响. 通过对钨合金材料的动、静态实验研究与数值模拟研究可以得出如下结论: (1) 钨合金材料是应变率敏感材料, 随着应变率的升高其极限强度也明显提高; (2) 钨颗粒长径比对钨合金材料弹性模量、屈服应力和强化模量的影响不大; (3) 随颗粒质量分数的增加, 钨合金材料的屈服应力有所提高.

参 考 文 献

- 1 张太全, 王玉金, 宋桂明. 钨及钨合金的变形、断裂及强化机制研究综述. 有色金属, 2004, 56(1): 7-12 (Zhang Taiquan, Wang Yujin, Song Guiming. Review of deformation/failure/strengthening mechanism of tungsten alloys. *Non-ferrous Metals*, 2004, 56(1): 7-12 (in Chinese))
- 2 Dandekar DP. Loss of shear strength in polycrystalline tungsten under shock compress. *Journal of Applied Physics*, 1976, 47(10): 4703-4705
- 3 Liu HY, Song WD, Ren HL. Dynamic response of tungsten-nickel-iron composites under impact loadings. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation*, 2009, 10(8): 993-1004
- 4 Woodward RL, Baldwin NJ, Bruch I, et al. Effect of strain rate on the flow stress of three liquid phase sintered tungsten alloys. *Metallurgical Transactions A*. 1985, 16: 2031-2037
- 5 Cimpoeru SJ, Woodward RL. High strain rate properties of three liquid phase sintered tungsten alloys. *Journal of Material Science Letters*, 1990, 9: 187-191
- 6 史洪刚, 郭志俊, 冯宏伟等. 钨合金微观组织断裂分析计算. 兵器材料科学与工程. 1999, 22(6): 3-6 (Shi Honggang, Guo Zhijun, Feng Hongwei, et al. Analysis and calculation of microstructure cracking in tungsten alloy materials. *Ordnance Material Science and Engineering*, 1999, 22(6): 3-6 (in Chinese))
- 7 Bao G, Ramesh KT. Plastic flow of a tungsten-based composite under quasi-static compression. *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993, 41(9): 2711~2719
- 8 Song WD, Ning JG, Liu HY. Study on the fracture behavior of W-Ni-Fe heavy alloys. *International Journal of Modern Physics B*, 2008, 22(31 & 32): 5453-5458
- 9 Böhm HJ, Eckschlagner A, Han W. Multi-inclusion unit cell models for metal matrix composites with randomly oriented discontinuous reinforcements. *Computational Materials Science*, 2002, 25: 42-53
- 10 Eckschlagner A, Han W, Böhm HJ. A unit cell model for brittle fracture of particles embedded in a ductile matrix. *Computa-*

- tional Materials Science*, 2002, 25(1-2): 85-91
- 11 Xue Z, Huang Y, Li M. Particle size effect in the metallic materials: a study by the theory of mechanism-based strain gradient plasticity. *Acta Materialia*, 2002, 50(1): 149-160
- 12 唐春安, 傅宇方, 林鹏. 颗粒增强复合材料基体破坏过程的数值模拟分析. *复合材料学报*, 1999, 16(3): 110-117 (Tang Chunan, Fu Yufang, Lin Peng. Numerical approach to failure process in brittle and heterogeneous matrix filled with particles. *Acta Materiae Compositae Sinica*, 1999, 16(3): 110-117 (in Chinese))
- 13 克雷斯基格. 泛函分析导论及应用. 北京: 北京航空学院出版社, 1987 (Kreyszing E. *Introductory Functional Analysis with Applications*. Beijing: Beihang University Press, 1987 (in Chinese))

(责任编辑: 刘希国)

MECHANICAL PROPERTY AND NUMERICAL SIMULATION ON W-NI-FE ALLOYS¹⁾

Song Weidong^{*,2)} Liu Haiyan[†] Ning Jianguo^{*}

^{*}(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

[†](School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract Tungsten alloy is a type of particulate reinforced composites and has wide military and civilian applications. It can be used as kinetic energy penetrator, radiation shielding material, balance mass in aerospace, vibrating material in cell phones, etc. These alloys are characterized by the high strength, high density and high toughness resulting from their special microstructural features. Because of their good strength as well as ductility, these alloys have been extensively studied for a variety of promising applications. So far, most studies mainly focused on the understanding of their densification mechanism, the two-phase microstructure evolution mechanism during sintering, and the relationship between the microstructure and mechanical properties. The two-phase composite structure of tungsten alloy determines that the macroscopic deformation and fracture behavior have close relation with the microstructure of the composites. Therefore, it is important to investigate the relationship between the microstructure and the mechanical properties of the composites under different loadings, which provides practical values for the improvement of the mechanical properties and the optimization of tungsten alloys.

In the current paper, MTS and SHPB techniques are used to investigate the mechanical properties of 91wt.% tungsten alloys. Based on the experimental results, finite element models of unit cells with typical structures of tungsten alloys are established. Fixed point iteration method is adopted to provide real displacement conditions for the finite element models. The effects of the microstructure parameters, such as particle size and volume fraction, on the mechanical characteristics of tungsten alloys under different tensile loadings, are examined and the corresponding stress-strain relations are obtained. The comparison of numerical predictions and the experimental results shows a good agreement. The numerical simulations demonstrate that tungsten alloys are rate-independent materials. The aspect ratios of tungsten particle have no obvious influence on the mechanical behavior of tungsten alloys, and the yield stress increase with the mass fraction of tungsten particles.

Key words tungsten alloys, dynamic behavior, numerical simulation, fixed point iteration method

Received 22 July 2009, revised 1 March 2010.

1) The project supported by the National Natural Science Foundation of China (91016013, 11032002, 10602008), the State Key Laboratory of Explosion Science and Technology (Beijing Institute of Technology)(ZDKT08-02, ZDKT10-03a) and the National Basic Research Program of China(2010CB832700).

2) E-mail: swdgh@bit.edu.cn