

文章编号: 1000-4750(2001)02-099-07

# 含 FGM 的涂层结构中热残余应力的分析与优化

张榕京, 黄晨光, 段祝平

(中国科学院力学研究所, 北京 100080)

**摘要:** 本文利用有限元方法和优化理论, 对含 FGM(Functionally Graded Materials)层的热喷涂构件中的残余应力进行了数值分析, 并获得了 FGM 内各组份体积含量分布的最优化形式和参数  $p$ 。同时, 我们也研究了喷涂构件的几何形状、涂层及基底的材料性能对于  $p$  的影响规律。在本文的分析中, 考虑了基底材料和 FGM 的塑性变形以及其性能对于温度的依赖。本文的工作将有利于含 FGM 层的热喷涂构件的设计与生产。

**关键词:** 有限元; 优化; FGM; 热喷涂

中图分类号: O34 文献标识码: A

## 1 引言

热喷涂构件近年来在航空、电力等行业中得到了广泛的重视和应用。因为它充分利用了高温合金等基底材料的高韧性和陶瓷等涂层材料良好的耐高温、抗磨损、抗腐蚀性能<sup>[1]</sup>。

涂层结构中, 涂层和基底材料在热物理和力学性能等方面有较大的差异。这种材料性能的不匹配导致了界面处的变形和残余应力的集中。界面处的残余应力能够导致基底材料的塑性变形和涂层及界面内微裂纹等损伤的萌生, 它的大小在很大程度上决定了构件的使用性能。Hsueh 等人<sup>[2-7]</sup>从实验、数值模拟和理论分析等不同角度研究了构件几何形状、材料性能等因素对构件中残余应力的分布和大小的影响。

通常, 人们认为在涂层和基底的界面处引入一个中间的过渡层, 将会减小材料性能不匹配引起的残余应力幅值, 并且能够在一定的程度上增加界面的结合强度。但是, 过渡层内的微结构和材料组份分布形式如何选择才能取得理想的效果呢? 这就涉及到了优化的问题。在这一方面 Kawasaki 等<sup>[8-11]</sup>以及 Drake 等<sup>[12-13]</sup>都进行了初步的尝试, 但是, 他们都没有采用迭代优化的算法, 只是在设计变量的变化空间选取了几点进行计算比较。无疑, 这样的结果是极不充分的。

收稿日期: 1999-10-02; 修改日期: 1999-12-07

基金项目: 国家自然科学基金重大项目(19891180)

作者简介: 黄晨光(1969), 男, 湖北汉川人, 博士, 从事冲击动力学与计算力学研究

有鉴于此，本文采用有限元方法和一阶优化理论系统研究了 FGM 层内，各组份材料体积百分比的最优化分布形式，并讨论了几何和材料等参数对过渡层优化结果的影响。

## 2 几何、数学模型和材料本构关系

典型含过渡层(FGM)的涂层结构示意图如图 1 所示。在研究 FGM 层中各组份含量的优化问题时，以  $\text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Ni}$  体系为例。其中， $\text{Al}_2\text{O}_3$  为抗高温陶瓷涂层， $\text{Ni}$  为高温合金。为研究源于材料制备过程中的残余应力，假设构件温度从 800K 降至 300K。这一问题可以用二维平面应变模型来处理，控制方程的数学表达式为，

$$\sigma_{y,j} = 0 \quad (1)$$

$$\varepsilon = \varepsilon^e + \varepsilon^p + \varepsilon^\theta = \frac{1}{2}(u_{i,j} + u_{j,i} + u_{i,k}u_{j,k}) \quad (2)$$

$$\sigma_y = \lambda\varepsilon_{kk}\delta_y + 2\mu\varepsilon_y^\theta \quad \varepsilon_y^\theta = \alpha\Delta T \delta_y \quad \Delta T = -500\text{K} \quad (3)$$

$$\sigma_y = 0, \quad x = a \quad \text{or} \quad y = 0, b \quad (4)$$

$$u_1 = 0, \quad \sigma_{12} = 0, \quad z = 0 \quad (5)$$

$$\sigma_y = u_z = 0, \quad \text{when } T = 800\text{K} \quad (6)$$

其中， $\sigma_y, \varepsilon_y, \varepsilon_y^\theta, \varepsilon_y^p, \varepsilon_y^e$  分别为应力场、应变场及弹性、塑性和温度应变。 $u_i, \lambda, \mu$  分别为位移场、组份材料的弹性参数。 $\alpha, \Delta T$  为材料的热膨胀系数和温升。方程 2 中塑性应变的计算由涂层结构中各材料的本构模型决定。在此假设  $\text{Al}_2\text{O}_3$  为简单弹性材料， $\text{Ni}$  为各向同性强化双线性弹塑性材料。

至于 FGM 的材料模型，采用了 Tamura 等<sup>[14]</sup>首先提出的混合法则，如图 2 所示。

$$\sigma_c = V_\alpha\sigma_\alpha + V_\beta\sigma_\beta \quad (7)$$

$$\varepsilon_c = V_\alpha\varepsilon_\alpha + V_\beta\varepsilon_\beta \quad (8)$$

$$V_\alpha + V_\beta = 1, \quad q = \left| \frac{\sigma_\alpha - \sigma_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \right| \quad (9)$$

其中， $\sigma_\alpha, \sigma_\beta, \sigma_c$  分别为陶瓷、金属和 FGM 的真实应力， $\varepsilon_\alpha, \varepsilon_\beta, \varepsilon_c$  分别为陶瓷、金属和 FGM 中的应变。 $V_\alpha, V_\beta$  为 FGM 中陶瓷和金属相的体积百分比。另外取  $q = 4.5\text{GPa}$ 。

FGM 中，在其与基底界面距离为  $y'$  处，陶瓷相的体积百分比含量为，

$$V_\alpha = (y'/h)^p \quad (10)$$

其中， $h$  为 FGM 的厚度。 $p$  为控制 FGM 中两相体积含量分布的参数。在本文中选为优化设计参量(Optimization Design Variables)。

文中选取的材料参数如表 1 所示<sup>[13]</sup>。

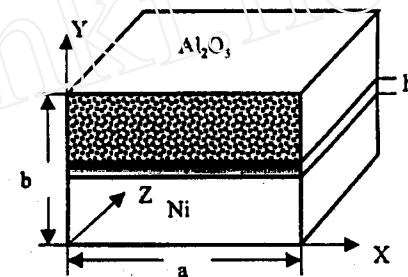


图 1 含 FGM 的热喷涂构件示意图

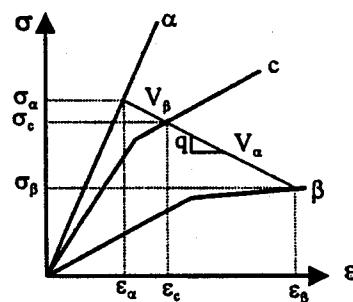


图 2 FGM 材料的混合法则示意图

表 1  $\text{Al}_2\text{O}_3$  及 Ni 的材料参数表

材料	温度(K)	屈服应力(MPa)	TEC ( $\text{K}^{-1}$ )	模量(GPa)	硬化模量(GPa)	泊松比
$\text{Al}_2\text{O}_3$	/	/	$7.4\text{e-}6$	380	/	0.25
Ni	300	148	$10.4\text{e-}6$	74	0.67	0.31
	400	153	$11.4\text{e-}6$	76	0.66	0.31
	500	140	$12.4\text{e-}6$	70	0.65	0.31
	600	138	$13.4\text{e-}6$	69	0.64	0.31
	700	115	$14.4\text{e-}6$	57	0.33	0.31
	800	100	$15.4\text{e-}6$	53	0.22	0.31

方程 1~6 中引入了弹塑性和 FGM 层，导致理论分析的困难，因此我们用有限元方法来求解。另外，本文采用的优化方法为一阶优化方法<sup>[13]</sup>(First order optimization method)。

### 3 结果讨论

利用有限元和优化方法，我们对如图 1 所示的含 FGM 的涂层结构进行了数值计算和优化分析。当  $a=30\text{mm}$ ,  $b=30\text{mm}$ ,  $h=10\text{mm}$  时，利用第二节的材料参数和模型，得到最优化的  $p$  值 2.51，同时得到了当  $p$  为 1 和 2.51 时，在  $x=a$  处(右刃边)单元上的  $\sigma_y$ ,  $\tau_{xy}$  的分布图(见图 3 和图 4)。

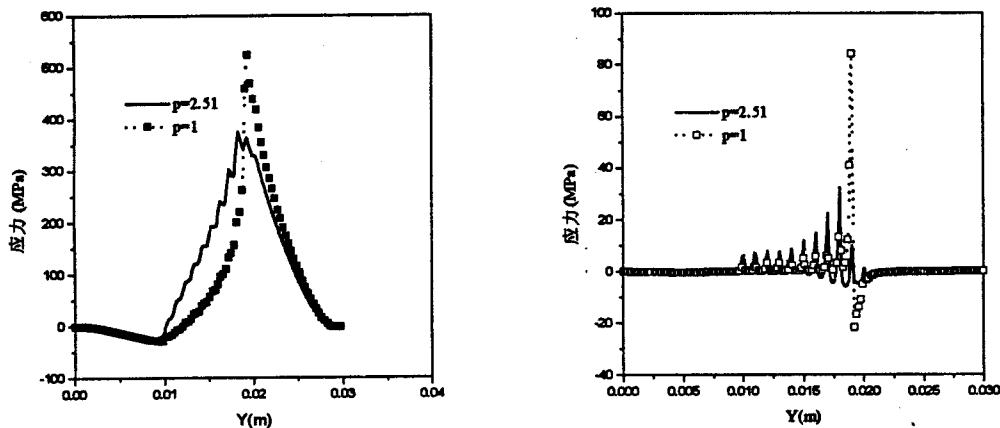


图 3 当  $p$  分别为 1 和 2.51(优化)时，构件自由边上的  $\sigma_y$  分布图

图 4 当  $p$  分别为 1 和 2.51(优化)时，构件自由边附近单元的  $\tau_{xy}$  分布图

从文献[13]中可知，在陶瓷和金属基底的界面处，引入 FGM 层后，确实可以明显减小由于材料不匹配引发的涂层构件中的残余应力。从图 3 和图 4 可以进一步得知：如果对 FGM 内材料组份含量的分布进行优化设计，将再次大幅度降低构件中的残余应力。如上例中，通过优化计算，可以降低  $y$  向正应力 30~40%，剪应力 50%以上。值得注意的是：正是这

两个应力分量在涂层的剥落、脱粘等失效模式中占主控地位。

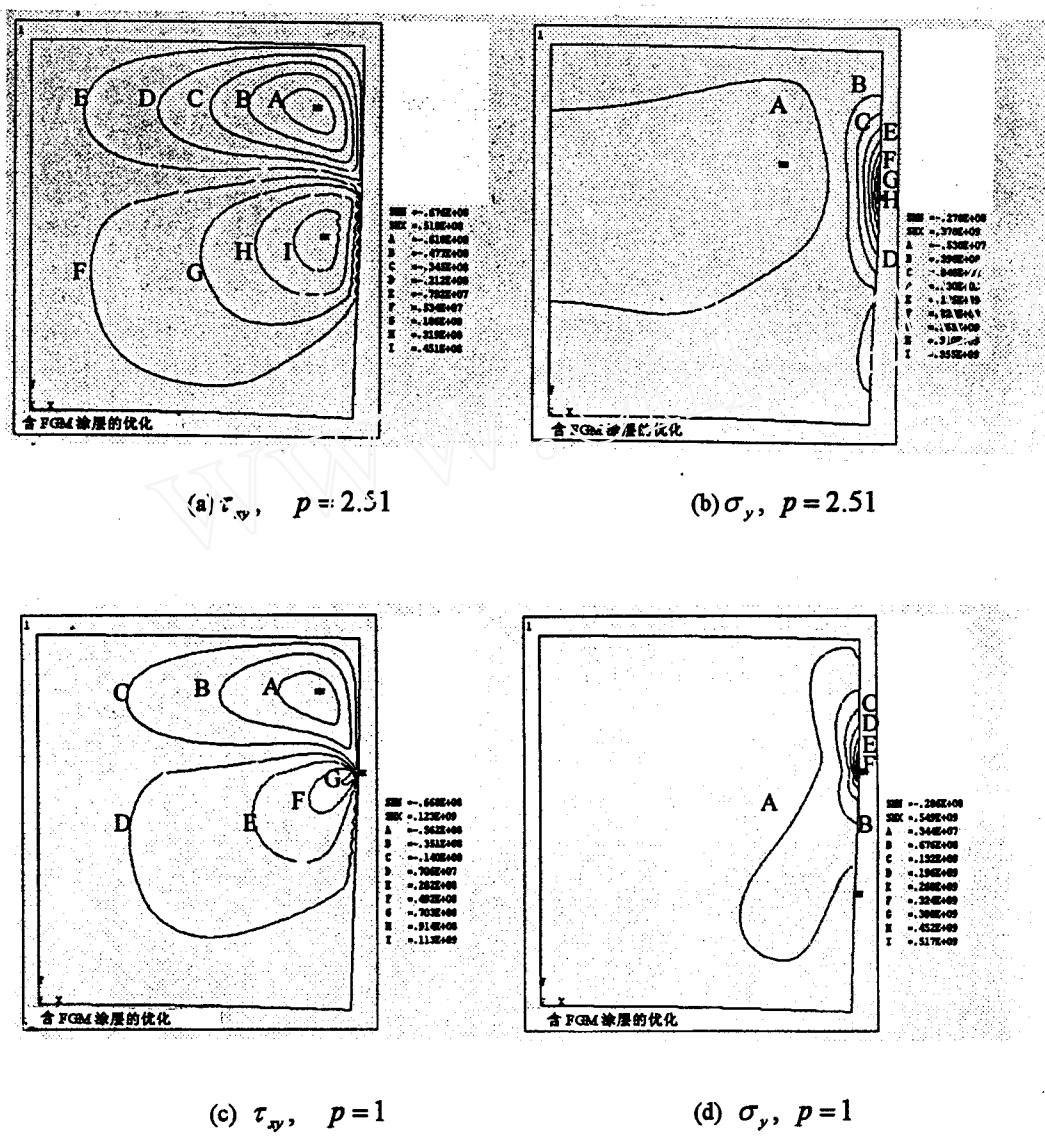


图 5 FGM 优化前后，喷涂构件内  $\tau_{xy}, \sigma_y$  的分布

另外图 5 显示了当  $p$  为 1 和 2.51 时，喷涂构件内  $\sigma_y, \tau_{xy}$  的分布，从中可以发现：对 FGM 内组份体积含量分布的优化，不仅大幅降低了两个应力分量的幅值，而且使构件内最大应力发生的位置有了转移—从界面转移到了 FGM 层内；从自由刃边( $x=a$ )转移到了构件内部。这两个转移的意义在于：使得最大应力避开了喷涂构件中最薄弱、最危险的地方。

一般地，喷涂构件的几何形状和涂层、基底的材料参数改变会明显影响构件中的热残余应力。为此，本文研究了几种几何、材料参数对 FGM 组份含量最优化分布的影响，结果详见图 6~8。

图 6 显示了最优化的 FGM 组份含量分布参数  $p$  对喷涂构件长宽比的依赖关系。当构件的宽度和 FGM 的厚度( $y$  方向)保持不变(分为 30mm, 10mm), 使构件的长度( $x$  方向)在 10mm~50mm 间变化, 可以发现, 随着构件长度的增加, 最优化的  $p$  值逐渐变小。图 7 则描述了 FGM 厚度变化对优化参数  $p$  的影响。此时喷涂构件的长宽分别为 10mm, 30mm, 让 FGM 层的厚度在 2mm~10mm 之间改变, 有限元优化计算结果表明: 随着 FGM 厚度的增大, 最优化的  $p$  值逐渐变小, 从 6.01 减小到 3.47。图 6 和图 7 无疑说明了这样的一个趋势: 随着构件长度的变大和 FGM 厚度的增加, 最佳的 FGM 组份含量分布形式将趋于线性, 即  $p=1$ 。

在前面的优化计算中, 一直采用了第二节说明的有关  $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Ni}$  体系的材料参数, 下面, 我们将分别改变材料的热膨胀系数等来研究材料参数对 FGM 最优化组份含量分布参数  $p$  的影响。我们固定构件的几何尺寸,  $a=10\text{mm}$ ,  $b=30\text{mm}$ ,  $h=5\text{mm}$ 。

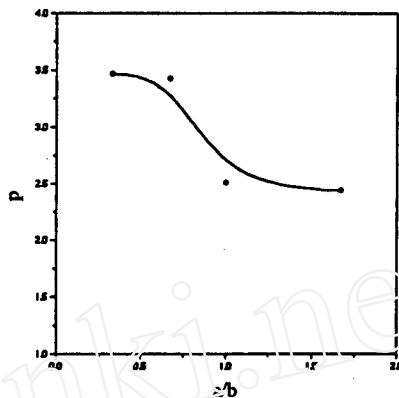


图 6 喷涂构件长宽比对 FGM  
最优化含量分布参数  $p$  的影响

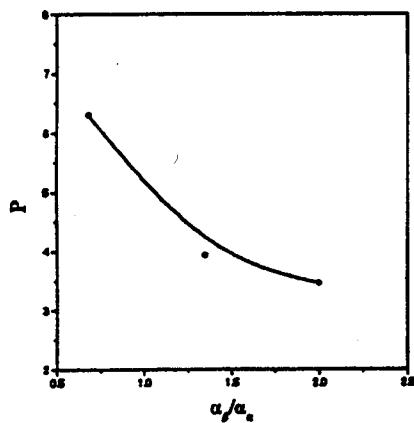


图 7 喷涂构件中 FGM 的厚度与 FGM  
最优化含量分布参数  $p$  的关系图

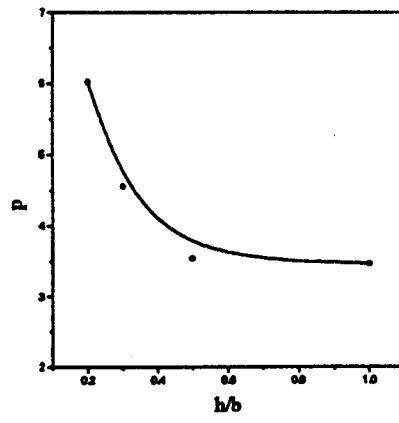


图 8 涂层与基底材料 TECs 的比值与  
FGM 最优化含量分布参数  $p$  的关系

使基底材料的热膨胀系数(TEC)在  $5 \times 10^{-6} \rightarrow 15.4 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$  之间改变, 可得到图 8 所示的最优化参数  $p$  的变化规律: 随着基底材料 TEC 的变大, 最优化  $p$  值逐步减小。在优化计算中, 目标函数的选择极为重要。在不同的目标函数下, 获得的最优化  $p$  值不同。本文在优化分析中, 尝试了诸如  $\sigma_y$ ,  $\tau_{xy}$ ,  $\sigma^{\text{eff}}$ ,  $\varepsilon_p^{\text{eff}}$  等不同的目标函数, 发现以  $\sigma_y$  为目标函数较为理想, 优化中  $\sigma_y$ ,  $\tau_{xy}$ ,  $\sigma^{\text{eff}}$ ,  $\varepsilon_p^{\text{eff}}$  各量都有大幅的下降。而以  $\tau_{xy}$  等为目标函数时, 则

往往会出现“顾此失彼”的情况。

#### 4 结论

本文利用有限元方法和优化理论对含 FGM 层的喷涂构件中的热残余应力进行了数值研究，发现：

1、对 FGM 内组份含量的分布形式进行优化，可以大幅减小结构中的残余应力，并且使残余应力各分量的最大值离开了结构的薄弱和危险处。

2、当构件长度变大和 FGM 厚度增加时， $p$  值逐渐减小。当长度和厚度继续加大时，最佳的 FGM 组份含量分布形式趋于线性。

3、随着基底材料 TEC 的变大，最优化  $p$  值逐步减小。

下一步，我们将对含 FGM 的热障涂层材料在热冲击下产生的热应力进行分析和优化，以提高热喷涂构件的使用性能。

#### 参考文献：

- [1] V V Sobolev, J M Guilemany, J Nutting, et al. Development of substrate-coating adhesion in thermal spraying[J]. Int. Mater. Review, 1997, 42(3): 117-135.
- [2] C H Hsueh, A G Evans. Residual stresses in metal/ceramic bonded strips[J]. J. Am. Ceram. Soc. 1985, 68: 241-248.
- [3] E Reimanis, B J Dalgleish, A G Evans. Strength of ceramics bonded with metals[J]. Acta. Metall. Mater. 1987, 39: 110-121.
- [4] V V Lyubimov, A A Voevodin, S E Spassky, et al. Stress analysis and failure possibility assessment of multilayer physically vapour deposited coatings[J]. Thin Solid Films, 1992, 207: 117-124.
- [5] C C Chiu. Mater. Inverse scattering of a buried conducting cylinder[J]. Sci. Eng. A, 1992, 150: 139-153.
- [6] M Hu. Numerical analysis of residual stresses and thermal stress in the ceramic-metal system[J]. J. Appl. Phys. 1991, 70: R53-R61.
- [7] W A Zdaniewski, J C Conway, H P Kirchner. Effect of grinding on the flexural strength of sialon ceramic[J]. J. Am. Ceram. Soc, 1987, 70: 110-119.
- [8] A Kawasaki, R Watanabe. Cyclic thermal fracture behavior and spallation life of PSZ/nicraly functionally graded thermal barrier coatings[J]. J. Jap. Inst. Metals. 1987, 51: 51-59.
- [9] A Kawasaki, R Watanabe. In: Proceedings of the international institute for science of sintering (IISS) symposium, (Ed. Somiya S, Shimada M, Yoshimura M, Watanabe R)[C]. Elsevier Science, England, 1988. 1197-1213.
- [10] T Hirai, M Sasaki. The effect of FGM on the residual stresses in the spraying coatings[J]. JSME Int. J. 1991, 34: 123-135.
- [11] T Hirano, T Yamada, J Teraki, et al. In: Proceedings of the 16th international symposium on space technology and science[C]. (Ed. AGNE), Japan, 1988. 375-389.
- [12] R L Williamson, B H Rabin, J T Drake. Finite element analysis of thermal residual stresses at graded

- ceramic metal interface. Part I: model description and geometrical effects[J]. J. Appl. Phys, 1993, 74(2): 1310-1320.
- [13] J T Drake, R L Williamson, B H Rabin. Finite element analysis of thermal residual stresses at graded ceramic metal interface. Part II: interface optimization for residual stress reduction[J]. J. Appl. Phys, 1993, 74(2): 1321-1326.
- [14] T Tamura, Y Tomota, H Ozawa. In: Proceedings of the third international conference on strength of metals and alloys[C]. (Ed. Institute of Metal and Iron and Steel Institute), England, 1973. 611-624.
- [15] ANSYS Co. ANSYS theoretical Manual (Electronic Press)[R]. 1997.

## SIMULATION AND OPTIMIZATION OF THERMAL RESIDUAL STRESS IN COATING STRUCTURE WITH FUNCTIONALLY GRADED MATERIAL LAYER

WANG Rong-jing , HUANG Chen-guang , DUAN Zhu-ping

(Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 1000080)

**Abstract:** An elasto-plastic finite element method is developed to predict the thermal residual stress of thermal spraying coatings with functionally graded material (FGM) layer. The optimized distribution form and parameter  $p$  about the volume fractions of various constituents in the FGM are obtained by the first order optimization method in the  $\text{Al}_2\text{O}_3$ -Ni model system. The effects of geometry and material behavior on the optimization results are investigated numerically, including the temperature sensitivity of FGM and substrate material. It is found that the optimization of the constituent contents in FGM reduces the magnitude of residual stresses to a large degree. And the maximum residual stresses shun the weakest part of the coating structure by the optimization designing. When the length of specimen, the thickness of FGM layer and the thermal expansion coefficient of the substrate increase, while the distribution parameter  $p$  decreases. The results presented in this paper are useful for the design of thermal spraying coatings.

**Key words:** finite element method; optimization; FGM; thermal spraying