

纯铁相变和层裂损伤的数值模拟^{*}

种 涛^{1,2}, 唐志平¹, 谭福利², 王桂吉², 赵剑衡²

(1. 中国科学技术大学近代力学系, 安徽 合肥 230027;

2. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621999)

摘要: 基于 Hayes 多相状态方程、非平衡相变速率模型、非平衡损伤演化模型和含损伤的本构关系, 建立了同时考虑相变和损伤的数值模拟方法。利用该方法对纯铁的对称碰撞实验进行了数值模拟, 分析了纯铁的相变和层裂损伤的相互作用。结果表明, 纯铁材料中发生相变时, 等厚样品中才会发生层裂, 并且数值计算的样品自由面速度、层裂位置与实验结果吻合。

关键词: 相变; 层裂; 多相状态方程; 对称碰撞实验

中图分类号: O521.2; O346.4

文献标识码: A

相变是材料动力学研究的重要领域之一, 动高压下材料的相变对材料的动态响应特性有着重大的影响: 一方面, 相变后材料具有和初始材料不同的物理、力学性质, 实质上已经成为一种新材料; 另一方面, 相变会强烈地改变介质中应力波波形, 造成波阵面的三波结构。层裂是冲击载荷下材料最常见的一种破坏模式, 与材料内部应力波的演化过程密切相关。因此, 研究相变对层裂行为的影响以及相变和层裂之间的联系是目前材料冲击动力学研究中的热点问题。

1957 年, Bancroft 等^[1]在冲击实验中观察到铁的双波结构(P1 波和 P2 波), 这也是首次通过实验观察到金属的固-固多形相变。随后, Barker 等^[2]对铁进行了大量的冲击压缩相变实验, 采用高精度的 VISAR (Velocity Interferometer System for Any Reflector) 测速装置得到了铁后表面的速度剖面, 并利用非平衡态相变速率方程对相变过程进行分析, 得出该相变的弛豫时间为 $0.06 \sim 0.18 \mu\text{s}$ 。Voltz 等^[3]首次设计完成了纯铁在不同压力条件下的对称碰撞实验, 并通过理论分析得到了相变与层裂的相互关联。唐小军等^[4]利用纯铁的对称碰撞实验发现了“反常”二次层裂的存在, 并指出该现象是由冲击相变引起的。张林^[5]从实验、数值模拟和回收分析方面对延性材料在冲击加载下的动态损伤和结构相变进行了比较系统的研究, 发现当对单相采用 Mie-Grüneisen 状态方程、对混合相采用质量分数加权平均进行描述时, 数值模拟与实验结果吻合较好, 但未讨论相变速率的影响。陈永涛等^[6-7]从应力波相互作用的角度分析了“反常”二次层裂的形成原因, 指出纯铁材料的冲击相变和卸载逆转变及引发的稀疏冲击波是导致“反常”二次层裂的物理机制。裴晓阳等^[8]开展了铁的相变及其对层裂影响的数值模拟工作, 其思路是利用损伤度分别对多相状态方程和屈服应力进行修正, 其计算结果和实验基本吻合。

在以上工作基础上, 本研究通过开展同时考虑 Hayes 多相状态方程、非平衡相变速率模型、损伤演化速率和弹塑性转变的一维流体动力学数值模拟研究, 对铁的对称碰撞进行数值计算, 分析铁冲击相变与层裂损伤之间的相互影响。

^{*} 收稿日期: 2017-02-20; 修回日期: 2017-03-26

基金项目: 国家自然科学基金委重大科研仪器设备研制专项(11327803); 国家自然科学基金(11502252, 11302204); 四川省青年科技创新研究团队专项计划项目(2016TD0022); 科学挑战专题(JCKY2016212A501)

作者简介: 种 涛(1986—), 男, 博士, 主要从事动高压实验加载技术和材料动力学行为研究。

E-mail: maoda318@163.com

通信作者: 赵剑衡(1969—), 男, 博士, 研究员, 主要从事强激光破坏机理、爆轰物理、冲击动力学、超高速发射和超高压加载技术研究。E-mail: jianh_zhao@caep.cn

1 数值模拟方法

1.1 含相变的本构关系

Hayes^[9]建立了具有 N 个转变相的动态相变本构模型,该模型是在研究铋的冲击相变时提出的。由于铋的相变以体积变化为主,形状变化较小,因此这一本构关系只考虑了静水压力的影响,没有考虑偏应力的影响,不适用于以形状变化为主的相变。基于 Hayes 的工作,郭扬波等^[10]建立了同时考虑静水压和偏应力对相变影响的临界准则。以此临界准则为基础,通过假定各相处于当地的力和热平衡状态,可以建立描述动态压缩下混合相变形过程的三维增量型相变本构方程如下

$$\dot{p} = K_{\xi}(\dot{\epsilon}^V - \Delta\epsilon^V\dot{\xi} - \alpha_{\xi}\dot{T}) \quad (1)$$

$$\dot{s}_{ij} = \begin{cases} 0 & \sigma_e > Y^C \\ 2\mu_{\xi}(\dot{\gamma}_{ij} - \Delta\gamma_{ij}\dot{\xi}) & \sigma_e \leq Y^C \end{cases} \quad (2)$$

$$\dot{T} = -\frac{T\Delta\eta\dot{\xi} + A_0 s_{ij}\dot{\gamma}_{ij}}{c_{p,\xi}} \quad (3)$$

式中: p 为压力, ϵ^V 为体应变,“ $\cdot$ ”表示对时间求导; T 为温度; ξ 为新相质量分数; γ_{ij} 为偏应变率; $\Delta\epsilon^V$ 、 $\Delta\gamma_{ij}$ 和 $\Delta\eta$ 分别为相变引起的体应变间断、偏应变间断和熵增; K_{ξ} 、 α_{ξ} 、 μ_{ξ} 和 $c_{p,\xi}$ 分别为新相质量分数 ξ 时的体模量、体积膨胀系数、剪切模量和定压比容; σ_e 为有效应力; Y^C 为屈服应力; s_{ij} 为偏应力; A_0 为材料的塑性应变能转换为热的系数,对于等温过程, $A_0 = 0$,对于绝热过程, $A_0 = 0.9$ ^[11]。该本构方程给出了静水压、偏应力、温度变化率与体应变、偏应变、各相含量的变化率之间的关系,可以较好地描述材料在动态加载下的相变过程。材料多相状态方程主要的物性参数如表 1 所示,其中体膨胀系数和定压比容相变对数值计算影响较小,因而可以忽略其在相变前、后的变化。

表 1 材料多相状态方程参数^[5,11-12]

Table 1 Material parameters of the multi-phase equation of state^[5,11-12]

Phase	K_{ξ}/GPa	α_{ξ}	μ_{ξ}/GPa	$c_{p,\xi}/(\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{kg}^{-1})$	$\Delta\epsilon^V$	A_0
$\alpha\text{-Fe}$	176.0	3.6×10^{-5}	77.5	440	0.03	0.9
$\epsilon\text{-Fe}$	181.0	3.6×10^{-5}	79.5	440		

相变速率方程为

$$\dot{\xi} = \frac{H}{rk_B T} \frac{G_1 - G_2}{\tau} \quad (4)$$

$$H = \begin{cases} 1 - \xi & G_1 - G_2 \geq D_{12} \\ 0 & -D_{21} < G_1 - G_2 < D_{12} \\ \xi & G_1 - G_2 \leq -D_{21} \end{cases} \quad (5)$$

式中: k_B 为 Boltzmann 常数; r 为单位体积中的原子数; τ 为相变弛豫时间,决定了建立相变平衡所需要的时间; H 为相变的驱动力; G_i 为 i 相的 Gibbs 自由能; D_{12} 和 D_{21} 为 1 相到 2 相相变和逆相变的能障。由相变速率方程可知,相变速率与相变驱动力成正比,而与松弛时间成反比,与可供其生长的空间成正比。本研究中相变弛豫时间取为 30 ns。

求解相变速率方程需要已知各相的 Gibbs 自由能,而 Gibbs 自由能则可以通过 Helmholtz 自由能(F)得到。当给定比容 v 和温度 T 时,铁的 Helmholtz 自由能可采用 Wallace^[13] 基于晶格动力学理论得到的表达式进行计算,即

$$F(v, T) = \phi_0(v) + F_H(v, T) + F_A(v, T) + F_E(v, T) \quad (6)$$

式中: $\phi_0(v)$ 为冷能; F_H 和 F_A 为晶格的热振动自由能,下标“H”和“A”分别表示其谐振分量和非谐振分量; F_E 为电子热激发自由能。各项的具体表达式和参数见文献[14]。

1.2 损伤演化方程及含损伤的 Johnson-Cook 本构模型

损伤理论中首先引入损伤度这一内变量,定义为空穴体积与总体积之比。采用袁福平^[15]推导的损伤演化方程,即

$$\dot{D} = [N(1-D)^2 + aD(1-D)] \left(\frac{\sigma_s}{\sigma_0} - 1 \right)^\lambda \quad (7)$$

式中: D 为损伤度, N 为空穴成核损伤因子, a 为空穴长大损伤因子, σ_s 为层裂处拉应力, σ_0 为空穴成核和长大的阈值应力, λ 为损伤率对相对阈值应力的依赖指数。

假设材料发生宏观层裂的极限损伤值为 D_c ,层裂条件可写为

$$D = D_c \quad (8)$$

当损伤达到极限损伤时,材料发生层裂。

改进型 Johnson-Cook 含损伤热黏性模型^[16] 为

$$\bar{\sigma} = [A + B(\bar{\epsilon}^p)^n] (1 + C \ln \dot{\epsilon}^*) (1 - T^{*m}) (1 - D) \quad (9)$$

$$\dot{\epsilon}^* = \begin{cases} \dot{\epsilon}^p / \dot{\epsilon}_0 & \dot{\epsilon}^p \leq \dot{\epsilon}_{lim}^p \\ \dot{\epsilon}_{lim}^p / \dot{\epsilon}_0 & \dot{\epsilon}^p > \dot{\epsilon}_{lim}^p \end{cases}, \quad T^* = \frac{T - T_r}{T_m - T_r} \quad (10)$$

式中: A 、 B 、 C 、 n 和 m 为物性参数, $\bar{\epsilon}^p$ 、 $\dot{\epsilon}^p$ 和 $\dot{\epsilon}_{lim}^p$ 分别为等效塑性应变、等效塑性应变率和等效塑性应变率极限, $\dot{\epsilon}_0$ 为参考应变率, T_r 和 T_m 分别为室温和材料熔化温度。该模型各参数物理意义明确,通用性较好。

表 2 改进型 Johnson-Cook 模型参数^[16]

Table 2 Parameters of corrected Johnson-Cook model^[16]

Material	A/GPa	B/GPa	C	n	m	N	a	σ_0/GPa	λ	D_c
Fe	0.792	0.55	0.014	0.26	1.03	0	7.6×10^5	3.5	2.9	0.25

2 数值模拟结果及分析

陈永涛等^[6]在一级轻气炮上进行了 2 发纯铁样品的等厚对称碰撞实验,其中样品和飞片尺寸均为 $\varnothing 95.0 \text{ mm} \times 6.28 \text{ mm}$ 。第 1 发实验中,飞片速度为 455 m/s,加载压力约 8.9 GPa;第 2 发实验中,飞片速度为 848 m/s,加载压力约 17.5 GPa。实验利用 VISAR 测速装置记录了样品自由面速度剖面,并利用软回收装置回收受试样品。

利用第 1 节中建立的方法对陈永涛等^[6]的实验进行了数值模拟,两次计算模型及参数完全相同。在同时考虑相变和损伤的条件下,计算结果和实验结果的比较如图 1(a)所示。分析可知,第 1 发实验中,其冲击加载压力约为 8.9 GPa,小于铁的相变压力 13.0 GPa,样品中无冲击相变发生。根据应力波传递规律可知,对于对称碰撞,碰撞结束后飞片速度为零,靶样品以飞片初始速度平飞,且靶样品中有等宽的塑性波来回振荡。图 1(a)中实验和计算结果与理论预测相吻合,第 2、3 个振荡应力波的时间宽度与第 1 个加载方波基本相等($T_{10} \approx T_{11} \approx T_{12}$),说明第 1 发实验中,最终飞片厚度和初始厚度相同,无层裂损伤产生。第 2 发实验中,其冲击加载压力约为 17.5 GPa,大于样品的相变压力,样品在加载过程中发生相变。由应力波理论可知,由于塑性波、相变波及后表面反射的稀疏波相互作用,靶样品中将发生层裂损伤。由图 1(a)可知,同时考虑相变和损伤得到的计算结果与实验结果基本吻合,再现了弹塑性转变、相变和层裂损伤一系列物理过程,并且计算所得相变压力约为 12.9 GPa,与文献[1]吻合。层裂后飞片厚度为 $h = C_0 T_2 / 2$, T_2 约为 $0.87 \mu\text{s}$,计算得飞片厚度 $h = 2.02 \text{ mm}$ 。层裂强度与速度差 Δu 相关^[16],通过计算可得,层裂强度为 1.36 GPa。

在不考虑相变、仅含损伤条件下,计算结果和实验结果的比较如图 1(b)所示。可以看出:对于飞片速度为 455 m/s 实验,计算和实验结果吻合良好;而对于 848 m/s 实验,计算与实验结果差异很大,计算结果显示样品无层裂产生,说明铁的对称碰撞过程中,层裂损伤的产生和相变有着密切的联系。

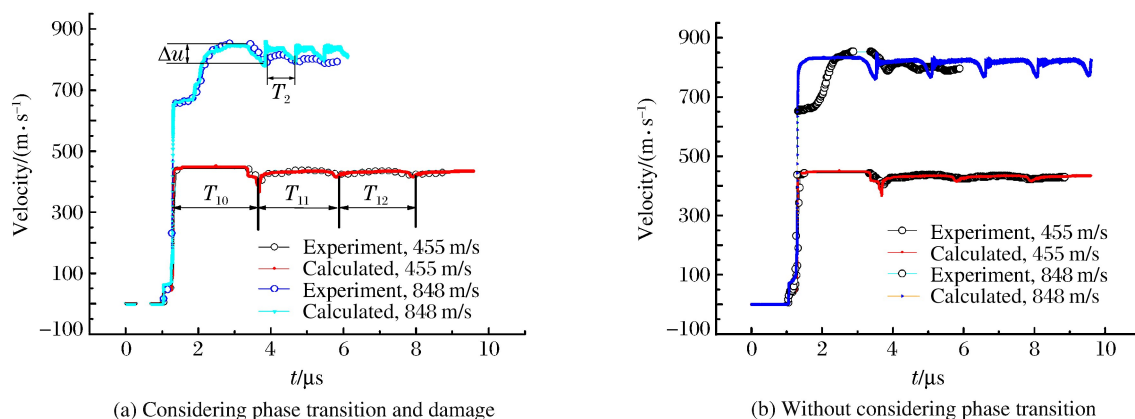


图1 纯铁样品自由面速度随时间的变化
Fig. 1 Free surface velocities of iron vs. time

3 结 论

通过对对称碰撞中纯铁相变和层裂的数值模拟,获得以下几点结论:

- (1) 基于 Hayes 多相状态方程、非平衡相变速率模型、损伤演化模型和含损伤的 Johnson-Cook 模型,对纯铁的对称碰撞实验进行了数值模拟,计算与实验结果基本吻合;
- (2) 当冲击加载压力小于纯铁的相变压力时,无相变和层裂损伤发生,只是简单的速度传递;
- (3) 当冲击加载压力大于纯铁的相变压力时,纯铁样品中发生相变,在相变波的影响下靶样品中发生层裂损伤,层裂强度约 1.36 GPa。

参考文献:

- [1] BANCROFT D, PETERSON E L, MINSHALL S. Polymorphism of iron at high pressure [J]. Journal of Applied Physics, 1956, 27(3): 291-298
- [2] BARKER L M, HOLLENBACH R E. Shock wave study of the $\alpha \rightleftharpoons \epsilon$ phase transition in iron [J]. Journal of Applied Physics, 1974, 45(11): 4872-4887.
- [3] VOLTZ C, ROY G. Study of spalling for high purity iron below and above induced $\alpha \rightleftharpoons \beta$ phase transition [C]// Shock Compression of Condensed Matter. New York: AIP Conference Proceeding, 2003: 511-514.
- [4] 唐小军, 胡海波, 李庆忠, 等. HR2 钢及几种铁基材料的冲击相变行为 [J]. 爆炸与冲击, 2006, 26(2): 115-120.
TANG X J, HU H B, LI Q Z, et al. Experimental studies on shock-induced phase transition in HR2 and other Fe-based materials [J]. Explosion and Shock Waves, 2006, 26(2): 115-120.
- [5] 张林. 延性材料冲击响应: 动态损伤与断裂、结构相变的新模型 [D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2005.
- [6] 陈永涛, 唐小军, 李庆忠, 等. 纯铁材料的冲击相变与“反常”层裂 [J]. 爆炸与冲击, 2009, 29(6): 637-641.
CHEN Y T, TANG X J, LI Q Z, et al. Phase transition and abnormal spallation in pure iron [J]. Explosion and Shock Waves, 2009, 29(6): 637-641.
- [7] 陈永涛, 唐小军, 李庆忠. Fe 基 α 相合金的冲击相变及其对层裂行为的影响研究 [J]. 物理学报, 2011, 60(4): 046401.
CHEN Y T, TANG X J, LI Q Z. Phase transition and influence of phase transition on spall in α phase Fe-based alloy [J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(4): 046401.
- [8] 裴晓阳, 贺红亮, 李平, 等. 铁的冲击相变及其对层裂影响的数值模拟研究 [C]// 第九届全国冲击动力学学术会议. 焦作, 2009.
- [9] HAYES D B. Wave propagation in a condensed medium with N transforming phases: application to solid-I-solid-

- II-liquid bismuth [J]. Journal of Applied Physics, 1975, 46(8): 3438-3443.
- [10] 郭扬波, 唐志平, 徐松林. 一种考虑静水压力和偏应力共同作用的相变临界准则 [J]. 固体力学学报, 2004, 25(4): 417-422.
- GUO Y B, TANG Z P, XU S L. A critical criterion for phase transformation considering both hydrostatic pressure and deviatoric stress effects [J]. Acta Mechanica Solida Sinica, 2004, 25(4): 417-422.
- [11] 唐志平. 冲击相变 [M]. 北京: 科学出版社, 2008.
- [12] 徐锡申, 张万箱. 实用物态方程理论导引 [M]. 北京: 科学出版社, 1986.
- [13] WALLACE D C. Thermodynamics of crystals [M]. New York: John Wiley and Sons, 1972.
- [14] 种涛, 王桂吉, 谭福利, 等. 磁驱动准等熵压缩下铁的相变 [J]. 中国科学: 物理学, 力学, 天文学, 2014, 44(6): 630-636.
- CHONG T, WANG G J, TAN F L, et al. Phase transition of iron under magnetically driven quasi-isentropic compression [J]. Scientia Sinica: Physica, Mechanica & Astronomica, 2014, 44(6): 630-636.
- [15] 袁福平. 复合应力波的传播特性和工程效应研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2002.
- [16] 曹结东. 含损伤热粘塑性本构数值算法和铝锂合金动态响应研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2006.

Numerical Simulation of Phase Transition and Spall of Iron

CHONG Tao^{1,2}, TANG Zhiping¹, TAN Fuli², WANG Guiji², ZHAO Jianheng²

(1. Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology
of China, Hefei 230027, China;

2. Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang 621999, China)

Abstract: Based on the Hayes multi-phase equation of state, non-equilibrium phase transition rate and damage evolution rate equation, and the constitutive relation of materials, the numerical simulation method considering the phase transition and damage was proposed and then used to analyze the interaction between phase transition and spall of iron in the symmetric impact experiment of iron. The results show that it is only when the phase transition of pure iron occurs that spall emerges. In addition, the free surface velocities and the spall positions of the sample are in agreement with the experimental results.

Keywords: phase transition; spall; multi-phase equation of state; symmetrical impact experiment