

延性金属强冲击层裂的物理力学机制与数值模拟：从孔洞演化到多尺度建模*

王宁涛¹, 马方哲¹, 朱银波^{1,2}, 王裴³, 吴恒安¹

- (1. 超常环境非线性力学全国重点实验室, 中国科学技术大学近代力学系, 安徽合肥 230027;
2. 冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室, 中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川绵阳 621999;
3. 计算物理全国重点实验室, 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘要: 金属材料在强冲击载荷作用下发生的层裂破坏, 本质上源于微孔洞的成核、生长与汇合等多尺度损伤演化过程。本文围绕孔洞主导的细观机制, 对延性金属层裂行为的理论模型与数值模拟研究进展进行了系统综述。首先, 总结了孔洞成核机制从第二相粒子诱导的非均匀成核向均匀成核、位错发射及空位聚集等多机制协同发展的演变过程; 其次, 梳理了孔洞生长模型从经典空化不稳定理论向考虑黏塑性、微惯性及应变率效应的动态模型的发展; 进一步, 对孔洞汇合过程中局部化变形与损伤失稳的理论描述进行了归纳。在此基础上, 综述了分子动力学、有限元、流体动力学、相场法与近场动力学等多种数值方法在层裂模拟中的应用与特点, 并分析了多尺度建模在连接微观机制与宏观响应方面的关键作用。最后, 面向该领域当前研究在真实微结构表征、极端应变率下动力学机制、孔洞集体效应及跨尺度耦合等方面的挑战, 对未来发展方向进行了展望。本文有助于加深对金属层裂跨尺度物理本质的认识, 并为高应变率条件下的损伤预测与模型发展提供参考。

关键词: 金属层裂; 孔洞演化; 强冲击; 数值模拟; 多尺度建模

中图分类号: O347.3

文献标识码: A

延性金属在强冲击作用下的层裂是一种在武器物理^[1]、惯性约束核聚变^[2,3]、行星撞击^[4]以及防护工程^[5]等关键领域都极为重要的失效模式。由于它直接影响着承受冲击或震动的结构的完整性和使用寿命, 准确预测层裂现象对于评估在极端载荷条件下材料的可靠性至关重要。金属材料在强冲击载荷作用下易发生层裂破坏, 该过程本质上是由材料内部微观损伤逐步演化并最终导致宏观断裂的动态失效行为。大量研究表明^[6-12], 层裂的形成与发展高度依赖于材料内部微结构的演化, 尤其是微孔洞的成核、生长及汇合过程。因此, 从细观尺度出发构建物理机制明确的孔洞演化模型, 是实现层裂行为准确预测的关键。

围绕孔洞演化机制, 已有研究从实验观测、连续介质理论以及原子尺度模拟等多个层面展开。孔洞成核方面, 研究已从早期基于第二相粒子界面脱粘与颗粒破裂的非均匀成核机制, 逐步发展到考虑均匀成核、位错发射及空位聚集等多种微观机制的统一框架; 同时, 多尺度方法的发展使得应力状态、塑性变形不均匀性及微结构特征对成核行为的影响得到更系统的认识。在孔洞生长方面, 从经典的空化不稳定理论到考虑黏塑性、惯性及温度效应的动态模型, 逐步揭示了不同物理机制在不同阶段的主导作用。而在孔洞汇合阶段, 基于单胞模型与极限载荷理论的发展, 使得局部化变形与损伤失稳之间的关系得到进一步阐明。在数值模拟方面, 分子动力学 (MD) 方法能够直接刻画原子尺度的缺陷演化过程, 为理解层裂的微观机制提供了重要手段; 宏观尺度的有限元与流体动力学方法则在工程尺度问题中得到广泛应用, 然而, 传统方法在处理裂纹萌生、网格依赖性及强非线性

*收稿日期: 2026-07-29; 修回日期: 2026-09-03

基金项目: 科学挑战专题 (TZ2025016); 冲击波物理与爆轰物理全国重点实验室稳定支持项目 (JCKYS2024212103)

作者简介: 王宁涛 (2000—), 男, 博士研究生, 主要从事金属材料强冲击动态力学行为研究。

通讯作者: 王裴 (1975—), 男, 博士, 研究员, 主要从事材料动力学响应研究。E-mail: wangpei@iapcm.ac.cn

吴恒安 (1975—), 男, 博士, 教授, 主要从事固体力学研究。E-mail: wuha@ustc.edu.cn

性问题方面仍存在局限。近年来,相场法与近场动力学等新兴方法在层裂模拟中展现出良好的应用潜力,但其物理机制表征与计算效率之间仍需进一步权衡。

需要指出的是,层裂问题具有典型的跨尺度特征:微观缺陷的演化决定宏观动力学响应,而宏观应力波传播又反过来影响微观损伤机制。单一尺度方法难以全面描述这一复杂过程。因此,发展能够耦合微观物理机制与宏观响应的多尺度模型,已成为当前金属层裂研究的重要方向。基于此,本文围绕孔洞成核、生长与汇合模型的发展,系统梳理层裂损伤在不同尺度上的研究进展,并进一步总结多尺度建模的关键问题与发展趋势,以期高应变率条件下金属层裂行为的物理解释与预测提供参考。

1 孔洞成核、生长与汇合模型

1.1 孔洞成核模型

动态加载下孔洞成核的微观机制通常可分为两类:非均匀成核和均匀成核。非均匀成核通常发生在微米级缺陷位置,如夹杂物和第二相粒子。均匀成核则是指起源于完美晶格结构或晶粒内亚微观不均匀性的成核过程。本节将分别梳理这两类成核的研究脉络与最新进展,并结合文献指出下一步的研究方向。

1.1.1 非均匀成核

夹杂物和第二相粒子周围的变形是动态加载下孔洞成核的重要机制。在过去几十年中,已经提出了包含夹杂物或第二相粒子分散体的材料中孔洞成核的模型,以预测损伤起始。关于金属中第二相粒子处孔洞成核的认识最早可追溯至 Tipper 的工作^[13],其指出第二相粒子诱发的孔洞形成是材料提前断裂的重要来源之一。随后,Puttick^[14]通过系统的金相实验首次提供了直接而有力的显微证据,明确指出非金属夹杂物作为孔洞成核核心的关键作用,并区分了界面脱粘与颗粒断裂两种基本机制,同时揭示了不同材料中孔洞向宏观断裂演化路径的显著差异。此后,Cox 和 Low^[15]在对比 AISI 4340 钢与 18Ni 马氏体时效钢的研究中进一步明确了粒子尺寸与类型对孔洞成核的决定性影响:大尺寸 MnS 夹杂物因内部平面滑移导致界面应力集中而优先失效,而回火过程中析出的渗碳体颗粒则通过界面脱粘形成细小孔洞带;并通过定量分析表明孔洞成核是一个随应变连续演化的过程,其主导因素为局部应力水平与粒子尺寸,但与应力三轴度无关。Goods 和 Brown^[16]的研究则从低温塑性变形出发,系统阐述了孔洞成核所需的临界塑性应变,并提出了一个基于局部加工硬化的定量模型,将孔洞成核归因于粒子周围位错储存引发的内部应力积累,并给出了与材料剪切模量相关的界面失效判据;该模型不仅成功预测了成核应变随粒子尺寸线性增加的规律,也揭示了温度、界面结合强度与滑移模式等因素对成核的显著影响。随着理论模型的发展,Needleman^[17]通过引入考虑有限变形的内聚力区模型,将界面脱粘的起始、扩展及孔洞形成统一纳入连续体框架中,系统揭示了尺寸效应及应力三轴度对成核行为的显著影响,并建立了微观成核机制与宏观 Gurson 型本构^[18]之间的联系。围绕粒子断裂与界面脱粘之间的竞争机制,Babout 等^[19]提出了一个简明的理论框架,强调基体的屈服强度与加工硬化能力在决定损伤模式中的主导作用:硬基体因塑性受限导致粒子内部应力迅速升高而倾向于粒子断裂,而软基体则更易发生界面脱粘;这一预测在其利用原位 X 射线断层扫描的实验中得到直接验证。Charles 等^[20]进一步在内聚力模型基础上引入塑性应变依赖的界面特性,并结合 Weibull 统计描述粒子断裂,首次量化了局部塑性应变通过降低界面有效表面能与增强界面应力集中两条路径促进脱粘的机制,从而建立了一个能够预测不同基体材料中主导损伤机制的统一框架。

随着实验技术与多尺度模拟方法的发展,第二相粒子处孔洞成核的微观机制得到了更为细致的刻画。Achouri 等^[21]通过原位实验揭示,在具有高应力三轴度的拉伸应力状态下,氧化物夹杂物主要通过界面脱粘成核,而在剪切主导的应力状态下,夹杂物可能经历脱粘、破碎或两者并存的混合机制,如图 1 所示。Noell 等^[22]梳理了关于金属中第二相粒子处孔洞成核的微观机制与宏观准则的认识,整合了大量证据,从更统一的物理视角出发,强调孔洞成核需同时满足系统自由能降低与局部应力达到颗粒开裂或界面脱粘的临界值的双重条件,并指出变形诱导缺陷在促进成核中的普适作

用；对于微米级粒子，临界应力准则即可作为有效的连续介质尺度判据。近年来，随着原子尺度与多尺度模拟的发展，对成核机制的认识进一步深化。Zhao 和 Sills^[23]利用分子动力学研究了 FCC 铝中 θ 相颗粒的界面脱粘，在无塑性变形条件下，界面脱粘可由单一临界法向应力控制，且该应力与加载路径无关，验证了应力主导成核准则在纳米尺度的适用性；而在存在塑性变形时，产生高度非均匀的局部应变场显著放大界面应力集中，其影响可通过一个随等效塑性应变线性增加的塑性应力集中因子来量化，揭示了塑性变形的非均匀性在成核过程中的关键作用。进一步地，Sarmah 与 Jain^[24]结合分子动力学模拟与有限元分析的多尺度研究，指出粒子脱粘不仅取决于界面强度，还强烈依赖粒子的局部排列、形态与尺寸；例如，与加载方向成 $0-45^\circ$ 排列的粒子更易脱粘，一个粒子的脱粘还会促进邻近粒子的失效，而 θ 相与 η 相虽界面强度相近，但因形态与尺寸效应，其脱粘敏感性相差十倍。总体而言，现有研究已从早期的定性实验观察发展为涵盖连续体理论、细观力学模型及原子尺度模拟的多层次框架，逐步建立起对第二相粒子处孔洞成核机制的系统性与量化认识。

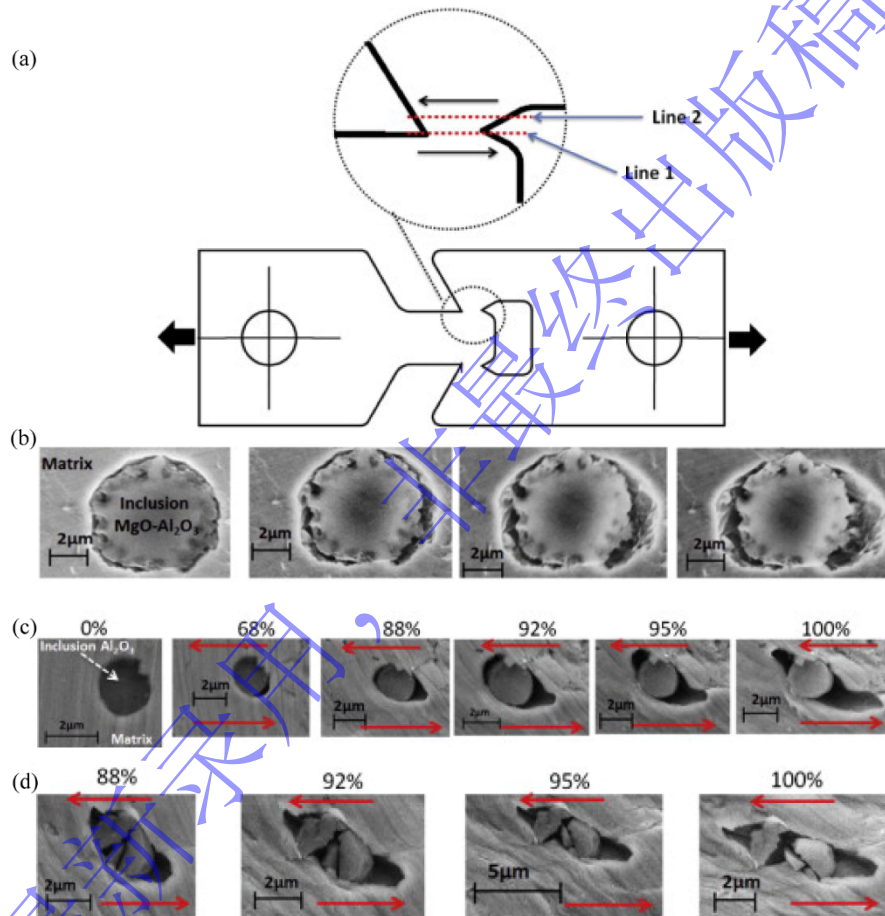


图 1 (a)原位拉伸的加载方向以及夹杂物位置^[21], (b)原位拉伸试验中脱粘导致的孔洞成核^[22], (c)剪切区脱粘导致的孔洞成核^[22], (d)剪切区夹杂物破碎导致的孔洞成核^[22]

Fig.1 (a) Loading direction and the location of the inclusions investigated^[21]; (b) void nucleation induced by decohesion during in situ tensile testing^[22]; (c) void nucleation caused by decohesion in the shear zone^[22]; (d) void nucleation resulting from inclusion fracture in the shear zone^[22]

1.1.2 均匀成核

微孔洞在第二相粒子处通过界面脱粘成核的机制主要适用于准静态加载条件下，在极端动态加载条件下，第二相粒子未必是孔洞成核位点的主要来源。在 Pedrazas 等^[25]开展的一项关于铝的激光冲击实验中（图 2），发现工业纯铝中大部分孔洞由第二相粒子成核，但是对于 99.999% 的高纯度铝只有约 5% 的凹坑中含有第二相粒子。这表明这些孔洞的大部分是在其它位点成核的，由扩散导致聚集产生的空位团簇是潜在的纳米孔洞均匀成核位点。虽然传统观点认为，在动态加载条件下，

空位扩散过程过于缓慢以至于难以发挥作用^[26]，然而 Reina 等^[27]利用晶格动力学蒙特卡罗模拟方法证明，这一过程所涉及的时间尺度实际上是可行的。许多原子层面的研究^[28-30]计算了通过从孔洞表面发射位错环来有效形成这些孔洞所需的拉伸应力水平大约为 $\mu/10$ （其中 μ 为材料的剪切模量），在激光冲击可达到的加载范围之内，表明位错发射可能是在高应变率加载下纳米孔洞生长的重要机制。

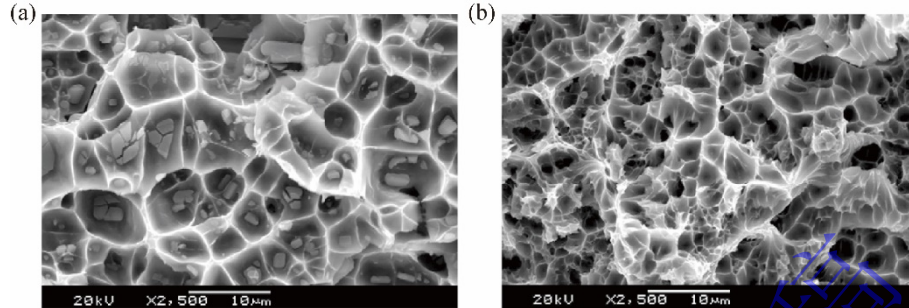


图2 层裂面的扫描电镜图像(a) 99%商用纯铝和(b) 99.999%高纯度铝^[25]

Fig.2 SEM images of spall fracture surfaces for (a) a 99% commercially-pure aluminum and (b) a 99.999% high-purity aluminum^[25]

在此基础上，发展了一些理论模型来分析位错发射过程并推导了基于应力的位错发射准则。比如，Lubarda 等^[31]通过简单的位错分析推导了一个封闭形式的准则，用于确定在均匀、线性弹性、各向同性无限介质中使一个无限延伸的圆柱形孔洞中产生一条直刃位错所需的临界远场静水压力，并进一步将这一分析扩展到考虑远场双轴应力状态^[32]。为了使该准则更适用于动态韧性破坏的连续体水平预测，Wilkerson 和 Ramesh^[33]扩展了 Lubarda 的模型^[32]，利用关于位错和孔洞弹性相互作用的解析解的稳定性分析推导了多孔固体中位错发射的一个准则。在他们的工作中，一般三维宏观应力状态下多孔材料中球形孔洞的位错发射被简化为一个二维问题，即无限延伸的圆柱形孔洞在无限各向同性线弹性介质中的位错发射。二维准则为位错发射的理论描述奠定了基础，然而，这些基于二维构型的模型引入了过多假设。例如，原始的三维宏观应力被近似为有效的二维应力状态，而分散的球形孔洞被近似为圆柱形孔洞阵列以得出有效孔隙度。这些假设有助于推导尽可能简单的封闭形式解，但也遗漏了一些重要信息。例如，位错发射的实际物理过程，即三维位错环的发射在二维构型中被过度简化，还有实际三维过程中一些重要因素的影响，如实际孔隙度或实际应力三轴度，无法在二维构型中直接研究。在三维位错环的力学描述方面，Willis 和 Bullough^[34]开创性地使用球谐函数分析了球形孔洞与圆形间隙位错环之间的相互作用。在此基础上，Ahn 等^[35,36]提出了静水加载下理想弹性材料中棱柱位错环发射的临界应力概念。然而，他们模型未包括一些重要因素，如发射位置、多孔软化和应力三轴度。随后，Sui 等^[37]提出了一种多孔介质中的轴对称三维位错环发射准则，用于确定棱柱位错环的临界发射应力以及指定球形孔隙表面发射位置的相应发射角。基于该模型，他们系统地研究了三维构型中影响棱柱位错环发射的因素，如几何参数、应力三轴度和孔隙度。结果表明，位错偶极子的临界发射应力随位错宽度和孔洞尺寸的减小而降低。多孔介质中孔洞处位错偶极子的发射将因其他位错偶极子的成核和生长而得到促进，如图 3(a)所示。此外，临界发射应力受应力三轴度的显著影响，当加载状态从单轴拉伸变为静水拉伸时，随着应力三轴度的增加临界发射应力显著降低，如图 3(b)所示。虽然轴对称三维模型很接近实际结构，但其仍无法准确描述实际的发射过程，也无法反映单晶的晶体学特征。Sui 等^[38]进一步基于近乎真实的三维位错发射构型，提出了一种用于预测临界成核应力的能量准则并分析了潜在成核位点尺寸、晶体取向以及温度对临界成核应力的影响。总体而言，尽管针对孔洞成核的研究已取得一系列进展，但现有的研究大多缺乏实验验证且对真实的微结构建模不足，需要更深入的研究。

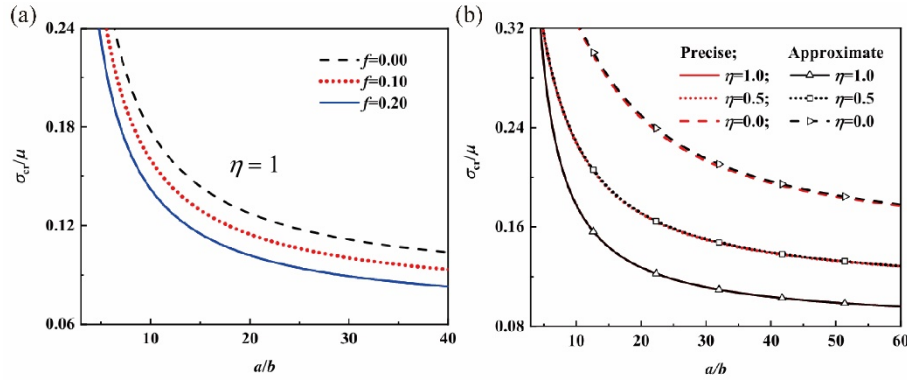


图 3 (a) 孔隙度对位错发射的影响; (b) 应力三轴度对位错发射的影响^[37]

Fig.3 (a) Effect of porosity on dislocation emission; (b) effect of stress triaxiality on dislocation emission^[37]

1.2 孔洞生长模型

孔洞一旦形成, 它们会通过塑性变形而生长, 当拉伸应力水平足够高时, 由于该孔洞的不断扩张而从其周围区域释放出的能量, 足以推动其继续扩张, 这种现象有时被称为空化不稳定性。早期的研究将孔洞的形成视为一种在原本均匀的理想弹塑性^[39]、非线性弹性^[40]或幂律硬化介质^[41]中发生的空化不稳定性现象, 并逐步发展出不同的孔洞生长模型。总体而言, 现有模型可根据其描述尺度和基本假设分为基于理想化孔洞几何的模型、基于连续体孔隙度的模型以及考虑材料率相关性和微观机制的动态孔洞生长模型。McClintock^[42]研究了刚塑性介质中长圆柱形孔洞的扩张与汇合, 指出孔洞增长与静水拉应力、应变硬化、各向异性及应变梯度等因素密切相关。随后如图 4(a)所示, Rice 和 Tracey^[43]将研究对象扩展至无限介质中的孤立球形孔洞, 建立了经典的 Rice-Tracey 孔洞生长模型。该模型表明, 孔洞增长受到塑性变形和应力三轴度的显著控制, 孔洞体积增长率随平均正应力与材料屈服应力之比呈指数增加; 在较高三轴拉应力下, 孔洞的体积增长明显占主导, 因此其形态可近似保持球形。

Rice-Tracey 模型随后成为延性孔洞增长研究的重要基础, 但其主要针对预先存在的孤立孔洞, 并未描述孔洞成核及孔洞间相互作用和最终汇合过程。由空化不稳定引起的孔洞形成也已在一些分子动力学研究中得到探讨, 并且在过去五十年间, 众多微观力学模型也相继被提出, 其中应用最为广泛的是图 4(b)中的 Gurson 模型^[18]以及后来被称为 GTN 模型^[44]的修正版本。早期的研究分析了在完全均匀、无率相关性且理想塑性的介质中单个孔洞的变形情况^[42,43]。随后, 一些研究将黏塑性特性纳入其中^[45-47], 证明了对准静态孔洞生长的稳定作用, 但其经典形式仍采用等效球形孔洞的连续体描述, 不能直接解析单个孔洞的真实形状变化及孔洞之间的几何连接。随着动态加载研究的发展, 研究者进一步将应变率、黏塑性和微惯性引入孔洞生长模型。Knowles 和 Jakub^[48]首次将微惯性纳入非线性弹性球壳分析。后来, Carroll 和 Holt^[49]将分析扩展到了无率相关性、理想弹塑性材料中孔洞的动态生长。他们得出结论, 弹性可压缩性的影响非常小, 以至于位移场可以取决于孔隙的生长情况。Johnson^[50]则将材料黏性纳入分析, 并得出结论: 对于所考虑的情况, 黏性的稳定作用要大于微惯性的稳定作用。进一步地, 如图 4(c)中 Wu^[51-53]在一系列工作中对弹黏塑性介质中单个球形孔洞的动态增长问题进行了全面的重新审视, 详细阐述了微惯性、率相关性、变形硬化、热软化和应变梯度效应的相对重要性。这项工作清楚地表明, 黏塑性控制着孔洞生长的早期阶段; 然而, 随着孔洞变大, 微惯性很快成为主导因素。Ortiz 和 Molinari^[54]从能量的角度也研究了在幂律硬化材料中单个孔洞的动态生长过程。发现微惯性在孔洞生长阶段中起主导作用, 并且他们表明, 微惯性的影响在孔隙尺寸大于特征尺寸之前并不显著。

考虑到由于微观结构导致材料的不均匀性, 孔洞成核临界应力因位置而异。Molinari 和 Wright^[55]引入了概率密度函数 Weibull 分布和 Gaussian 分布来描述孔洞成核临界应力在不同成核位点的变化。除此之外, 他们给出了孔洞早期生长在常应变率加载下的相似解并分析了加载速率、加载应力峰值、成核位点密度、材料的物理性质等因素对达到临界孔隙度时所施加的压力以及孔隙尺

寸分布的影响。值得注意的是, 由于未考虑孔洞相互作用的影响, Molinari 和 Wright 提出的孔隙度演化函数仅适用于孔洞生长的早期阶段。即便如此, 利用概率密度函数来表示临界成核应力随位置的变化思想在后续工作中已被广泛采用。比如, Wilkerson 和 Ramesh^[56]假设晶界与晶体内部成核位点的临界成核压力满足有界幂律概率分布函数, 提出了一个理论模型说明尺寸依赖的成核准则与时间依赖的生长之间的竞争决定了层裂强度与晶粒尺寸之间的关系, 如图 5 所示。随着孔洞的不断生长, 孔隙度对材料的承载能力的削弱将不可忽略。Czarnota 等^[57]通过简化 Molinari 和 Mercier^[58]建立的多孔黏塑性应力-应变率关系得到了考虑孔隙度影响的孔洞生长模型。在该模型中孔洞演化被视为球壳模型在施加在外周上的径向拉力作用下的动态生长问题, 其中空化应力由 GTN 模型以及幂律形式的刚塑性本构假设得到。

基于传统的塑性本构关系的孔洞生长模型虽然可以很好地描述在中低应变率下动态响应, 范围从简单模型(例如刚塑性模型)到复杂模型(例如热力耦合幂律型率敏感性模型)。然而, 这种模型可能只适用于热激活滑动状态的位错运动。在极端载荷条件下, 变形速率的敏感性可能受位错阻力和相对论效应的影响。尽管已有若干基于微观力学的模型展示了应变率敏感性对动态孔洞生长的影响, 但专门为极高应变率开发的基于位错的黏塑性模型较少。Wilkerson 和 Ramesh^[59]首次研究了在极高应变率下位错动力学和亚结构演变对孔洞动态生长的作用, 并开发了一种计算效率高的方法来考虑这些影响, 他们的基本模型如图 4(d)所示。特别是考虑了相对论性位错拖曳和不断变化的可动位错密度对孔洞生长动力学的综合影响。且将这些影响与微惯性施加的限制进行了比较, 并讨论了每种机制控制孔洞生长速率的条件。Wilkerson^[60]进一步推导了这些控制方程的闭式近似解, 能够准确地捕捉孔洞尺寸历史的瞬态演化。除了对开发计算高效的动态韧性失效框架具有重要价值外, 这些闭式模型还有助于揭示复杂动态孔洞生长的潜在物理机制。特别是, 表明对于从粗大、微米级第二相粒子中成核的孔洞, 微惯性的瞬态效应非常重要。对于纳米级孔洞, 位错亚结构向饱和状态有限动力学的演变起着至关重要的作用。最近, Schmelzer 等^[61]研究了孔洞动态生长中外力功率的组成, 并提出了一种基于局部能量平衡的、用于描述经典球壳模型的降阶形式。在他们的工作中, 应力功率通过一个同时考虑热激活位错滑移与声子拖曳影响的黏塑性模型描述, 并利用因果熵分析了多种工况下的有限元模拟数据, 得到了应力功率的简化函数形式, 结果与目标数据集符合良好, 如图 4(d)所示。

总体而言, McClintock 模型主要考虑静水拉应力、应变硬化、各向异性和应变梯度, 并采用长圆柱形孔洞描述其几何演化; Rice-Tracey 模型主要考虑应力三轴度和塑性变形, 并将孔洞近似为保持球形的孤立孔洞; GTN 模型进一步从连续体尺度考虑孔隙度、应力三轴度、材料硬化以及孔洞成核与汇合, 但不直接追踪单个孔洞的形貌变化; 动态球壳及相关微观力学模型则进一步引入应变率、黏塑性、微惯性、热软化、应变梯度、位错动力学及声子拖曳等因素, 但多数仍采用球形或轴对称孔洞的理想化构型。因此, 现有经典模型大多能够描述孔洞尺寸、体积或孔隙度的演化, 而对真实三维孔洞形状由球形向椭球形、不规则形以及定向拉长等形貌变化的直接描述仍较为有限。

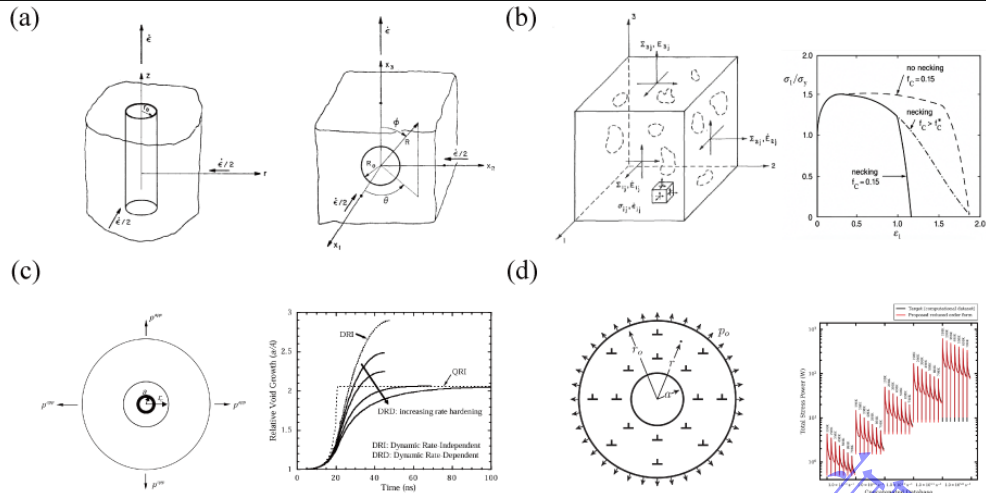


图 4 (a)长圆柱形孔洞以及孤立球形孔洞生长模型^[43]; (b)GTN 模型以及不同孔隙度下损伤演化行为^[18,44]; (c)动态孔洞生长模型^[51]; (d)考虑位错影响的球壳模型^[59]以及降阶函数形式与数值计算得到的总应力功率的比较^[61]

Fig.4 (a) Growth models for long cylindrical voids and isolated spherical voids^[43]; (b) GTN model and damage evolution behavior at different porosities^[18,44]; (c) dynamic void growth models^[51]; (d) spherical shell model incorporating dislocation effects^[59] and comparison between the reduced-order function form and the numerically computed total stress power^[61]

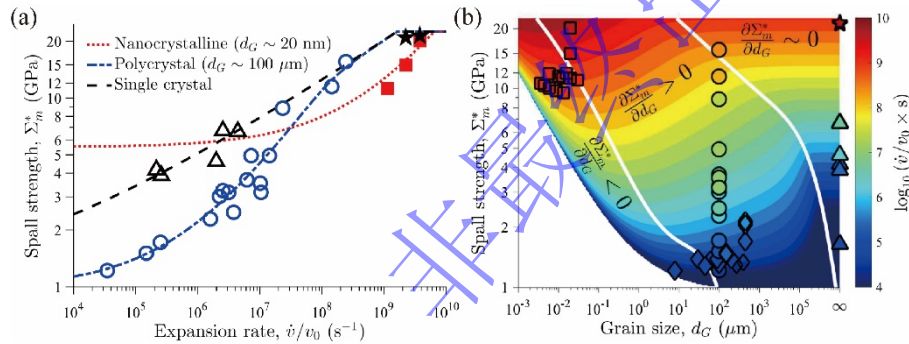


图 5 (a)理论预测与实验结果对比; (b)层裂强度的晶粒尺寸依赖性^[56]

Fig.5 (a) Comparison between theoretical predictions and experimental results; (b) grain-size dependence of spall strength^[56]

1.3 孔洞汇合模型

孔洞汇合是延性金属层裂损伤演化的关键阶段，其发生通常意味着材料内部孔洞之间形成贯通连接并导致材料快速破坏失效。因此，准确描述孔洞汇合对于预测延性断裂具有重要意义。现有孔洞汇合模型主要围绕几何临界条件、孔间韧带塑性局部化以及动态惯性效应等机制展开，并逐渐由简单的几何判据发展为考虑孔洞形貌、取向、应力状态及空间分布等因素的微观力学模型。早期研究通常采用简单的几何判据描述孔洞汇合，如果假设孔洞的生长过程如 Gurson 模型所述直至汇合，即与相邻孔洞连接，那么孔洞汇合的一个良好估计是在横向于主载荷的孔洞尺寸达到当前横向孔洞间距时，但这种方法会导致对断裂性能的显著高估^[62]。Tvergaard 和 Needleman^[44]引入了有效孔洞体积分数的概念，以表示在物质点失效的最后阶段孔隙度增长的加速，如图 6(b)。然而，单元计算所揭示的孔洞汇合与现象学中的表述之间存在一个重要差异，即前者表明单元的变形模式从三轴转变为纯单轴。对于无率效应的材料，这种转变表明出现了局部化现象，这是由于孔洞上方和下方区域开始出现弹性卸载，而塑性流动则局限于孔洞间的韧带。因此，孔洞的生长变得高度定向，直至发生汇合。这类模型属于宏观现象学损伤描述，并未直接解析实际孔洞之间的几何连接和局部塑性失稳过程。

随着对孔洞汇合微观机制认识的深入，研究者开始将孔间韧带的塑性局部化和内部颈缩作为孔洞汇合的主要物理机制。Thomason^[63]通过考虑平面应变载荷下的方形棱柱孔洞周期性阵列，试图寻求一种仅在孔洞间韧带引起塑性流动的近似极限载荷。Brown 和 Embury^[64]则要求在相邻孔洞之

间形成局部滑移线场,在他们的处理中,当孔洞高度大于等于其与相邻孔洞的间距时发生汇合。近二十年后, Thomason^[65]将其早期模型扩展至方柱状孔洞的三维周期性阵列。塑性流动由 von Mises 准则描述,并限制在孔间韧带区域,孔洞上方和下方的区域被建模为刚体。上述模型主要通过孔间韧带的塑性局部化和极限载荷条件描述孔洞汇合,重点考虑孔洞尺寸、孔洞间距及孔间韧带的塑性变形。在此基础上,基于单胞的微观力学模型进一步考虑孔洞几何形状及其周围材料的变形特征。Benzerga 和 Leblond^[66]通过考虑圆柱几何形状重新审视了 Thomason 的分析,得到了汇合准则的完整解析表达式。Molinari 等^[67]继续对 Benzerga 和 Leblond^[66]的孔洞汇合模型进行了扩展,考虑了惯性的影响。对于韧性断裂模拟,准则需考虑补充孔洞取向的演化律,这项工作由 Benzerga^[68]以及 Pardoen 和 Hutchinson^[69]完成,他们基于基体不可压缩性、边界条件和单胞模型,独立推导了损伤状态变量的演化方程,如图 6(c)。这类研究进一步关注孔洞形貌和取向演化对汇合过程的影响,使孔洞汇合模型由单纯的临界尺寸或极限载荷判据向损伤状态演化描述发展。如图 6(d), D.L.Tonks 等^[70]进一步用高应变率下的随机滤渗理论解释了断裂点,提出了一种通过孔洞聚集形成小尺度孔洞簇增长的模型。与上述基于单胞的模型不同,该模型从多孔洞空间分布及其聚集的角度描述孔洞汇合和最终断裂。张凤国等^[71]在分析孔洞之间几何关联的基础上,定义了一个新的耦合损伤及孔洞几何信息的孔洞汇合判定方法,同时,基于能量守恒原理解析了孔洞汇合对损伤快速增长影响的物理机理。结果表明:孔洞汇合后不仅引起损伤增长,而且导致了损伤材料内部微孔洞数目的减少、孔洞平均尺寸的增加。

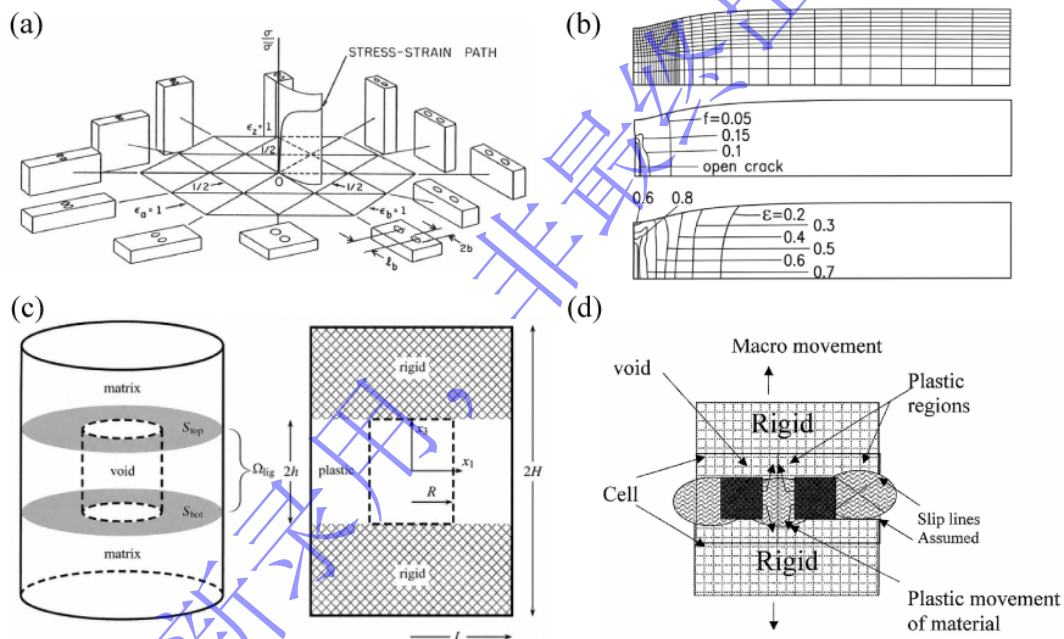


图 6 (a) 孔洞几何生长与汇合模型^[42]; (b) 宏观孔隙度损伤模型^[44]; (c) 基于圆柱形单胞的微孔洞汇合模型^[66]; (d) 孔洞聚集形成小尺度孔洞簇增长模型^[70]

Fig.6 (a) Void geometric growth and coalescence model; (b) macroscopic porosity damage model; (c) microvoid coalescence model based on a cylindrical unit cell; (d) model of void aggregation and the growth of small-scale void clusters

2 层裂数值模拟

2.1 微观尺度

在原子级别的微观尺度上,分子动力学(Molecular Dynamics, MD)模拟因其能够直接刻画原子尺度结构演化,已成为研究材料微观损伤机制的重要研究手段。传统宏观模拟往往依赖于经验或半经验的唯象准则,而分子动力学模拟能够基于原子间相互作用势,动态、全过程地捕捉位错成核与滑移、相变以及微孔洞成核与汇合等实验难以原位观测的原子级动力学过程^[72]。

针对理想单晶材料，分子动力学模拟确立了相态变化、各向异性及动态缺陷对层裂的控制机制。一方面是相变与层裂的耦合机制：如图 7(a)所示，Wang 等^[73]通过对单晶锡的模拟指出，随着冲击压力的增加，材料会依次经历固态层裂、卸载熔化及冲击熔化，相变导致层裂强度发生骤降，并直观呈现了固态层裂面断裂与液态大体积弥散空化区的形貌差异；并针对衰减冲击波作用下的卸载熔化铅，指出铅熔化程度的增加会导致层裂强度下降。在后续损伤阶段，总孔洞体积表现出随时间线性增加的特征，且部分熔化金属的孔洞增长速率受熔化程度主导，而液态金属则主要受拉伸应变率控制^[74]。另一方面是晶体本征各向异性与波系的相互作用，Zhu 等^[75]发现特定取向的单晶在冲击下会表现出强烈的弹性前驱波与塑性波分离，卸载稀疏波先后与弹性、塑性反射波发生两次独立交汇，诱发全新的“双点层裂”，并表现出更低的孔洞汇合程度和更缓的损伤累积趋势。此外，冲击诱导的动态缺陷与加载应力强度共同重塑了单晶的损伤模式：Jiang 等^[76]发现单晶铝冲击压缩阶段形成的位错和层错会使后续孔洞成核由均匀成核转变为非均匀成核，从而导致层裂强度在特定冲击区间内出现非连续突降，并改变强度的温度依赖性。

其次，从单晶向多晶及纳米多晶体系延伸，晶界等微结构对强冲击下的孔洞成核与演化起到了决定性的空间调控作用。纳米多晶材料在强冲击下存在位错、孪晶等丰富的力学行为及冲击硬化特性^[77]。如图 7(b)所示，在层裂断裂阶段，Dongare 等^[78]对随机分布的纳米多晶铜模拟发现，孔洞会优先沿着晶界萌生，并通过剪切无序的原子进一步生长；孔洞的成核对材料的微观结构和冲击压力具有很强的依赖性，而生长汇合阶段则不受这些因素影响。同时，微结构尺寸效应显著影响材料的层裂强度，Mackenchery 等^[79]指出孪晶密度是关键因素，特定纳米晶粒尺寸（如 6 nm 和 16 nm）在冲击过程中孪晶密度更高，其层裂强度也相应更高且更接近单晶水平。更为复杂的是，当冲击强度升高引发相变时，晶界对层裂的影响机制将发生彻底演变。Xiang 等^[80]对纳米多晶铅（Pb）的模拟系统揭示了这一过程（图 7(c)）：在传统固态层裂中，孔洞成核局限于晶界处；在卸载熔化状态下，熔化和成核过程均优先发生于晶界处；而一旦达到冲击熔化阶段，晶界的结构异质性被抹平，孔洞成核转变为在拉伸区内均匀发生，并伴随自由面附近的液态颗粒喷出。这充分表明多晶体系内的微观结构不仅改变了系统的应力分布，更显著影响不同热力学路径下的层裂失效模式。

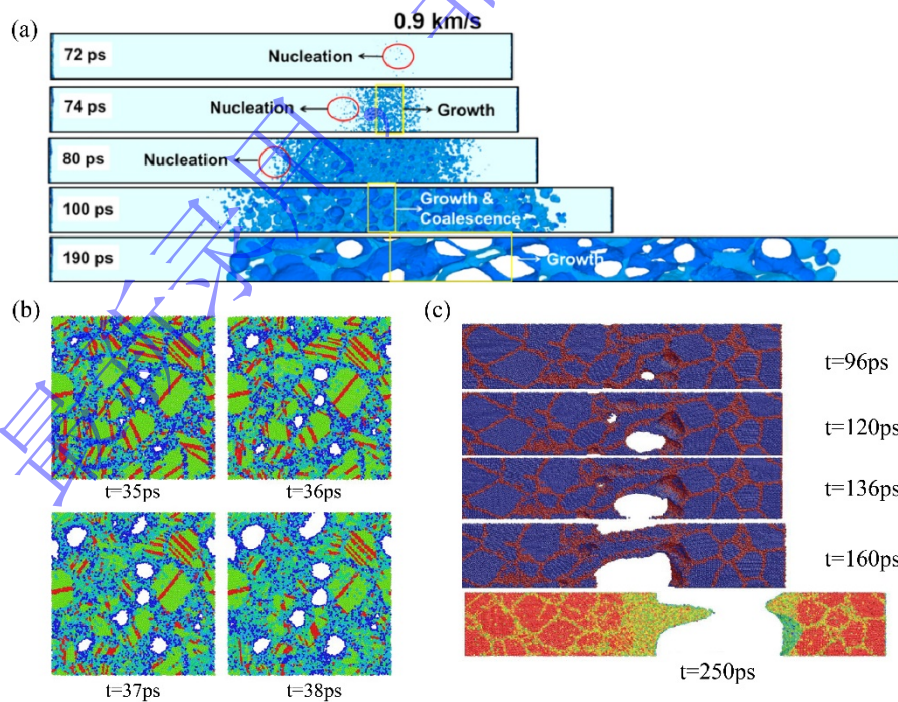


图 7 单晶与多晶金属中层裂损伤的典型原子尺度演化：(a)单晶锡在卸载熔化条件下的损伤演化^[73]，(b)纳米多晶铜中层裂平面附近孔洞的成核与长大^[78]，(c)纳米多晶铅在经典层裂条件下的空化过程^[80]

Fig.7 Typical atomistic evolution of spall damage in single-crystalline and polycrystalline metals: (a) damage evolution in single-crystal tin under release-melting conditions^[73]; (b) void nucleation and growth near the spall plane in nanocrystalline Cu^[78]; (c) cavitation process of nanocrystalline Pb under classical spallation conditions^[80]

材料内部的初始固有缺陷如氦泡同样会重塑动力学响应与宏观损伤形态。Zhou^[81]等通过对单晶铝的模拟,发现氦泡会改变传统由孔洞成核、长大与汇合主导的层裂过程,使损伤演化更多表现为氦气泡的扩张、汇聚及对周围小孔洞的吸收,并显著降低固态铝的层裂强度,而当材料熔化后这种影响则明显减弱;对于如图 8(a)所示的含有预设氦气泡多晶铝的复杂体系^[82],进一步研究含氦泡多晶铝在宽冲击应力范围内的层裂特征演化,发现此时损伤积累由氦气泡的扩张与汇聚主导,且晶界对气泡演化的影响并不显著。在强衰减冲击波加载下,发现并解释了靠近加载侧产生的一种由氦气泡扩张主导且无新孔洞成核的全新损伤区域,该区域的形成源于加载侧熔化产生的反向速度梯度与后续拉伸应力、氦气泡扩张的共同作用。这表明如氦气泡等初始缺陷不仅显著降低了材料的层裂强度,还能通过改变局部物理状态控制全新损伤模式的产生^[83]。

在更为复杂的冲击—卸载—再冲击的加载路径中,分子动力学模拟揭示了传统单次冲击条件下不易识别的复杂演化特征。如图 8(b)和(c)所示,在二次冲击和冲击-再压缩过程中,Wang 等^[84,85]系统模拟了单晶铜和多晶铜的动态响应,阐明了复杂波系交互作用下损伤演化、二次层裂与再结晶之间的微观耦合过程。针对二次冲击下的微观机制,Zhang 等^[86]在单晶铝的双衰减冲击模拟中,观察到了由“孔洞形成-坍塌-再次形成”机制控制的连续层裂事件;而 Wang 等^[87]研究了层裂损伤的后续演化,针对卸载熔化铅形成的微层裂损伤区,探讨了其在二次冲击再压实过程中的非经典物理机制。原有层裂孔洞的剧烈坍塌、原子碰撞以及微射流的形成,会诱发局部的超高温与高压。这揭示了层裂损伤在经历拉伸成核-再压缩闭合复杂加载路径下的极端热力学响应。

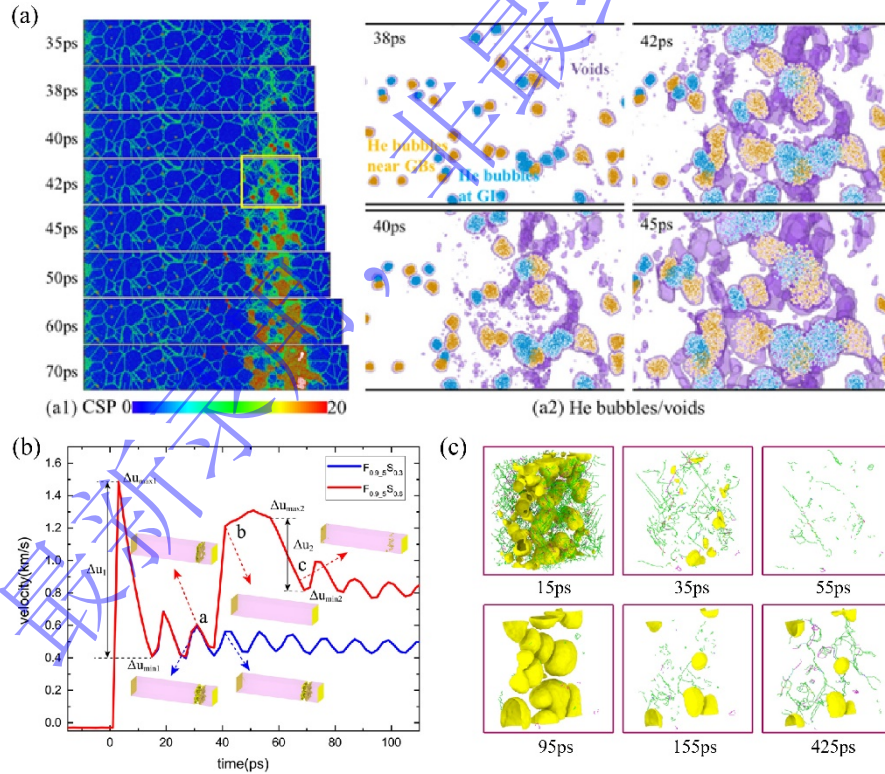


图 8 氦泡与复杂冲击条件下层裂损伤的原子尺度演化: (a)含氦泡多晶铝在 $u_p = 1.0\text{km/s}$ 冲击下的微结构演化^[82], (b)铜在二次冲击下的自由面速度演化及对应损伤^[84], (c)铜在二次冲击下层裂损伤区的微结构演化^[84]

Fig.8 Atomistic evolution of spall damage associated with He bubbles and double-shock loading: (a) microstructure evolution of poly Al-He at $u_p = 1.0\text{km/s}$ ^[82]; (b) evolution of the free-surface velocity and time-dependent damage stages of copper under double-shock loading^[84]; (c) microstructural evolution in the spall damaged region of copper under double-shock loading^[84]

MD 模拟可以对微观现象进行定性观察,更可以提炼定量的物理规律。通过分子模拟计算获取的成核阈值、孔洞演化率及临界应力等关键参数和解析表达式^[86],能够为宏观的近场动力学等跨尺度模型提供坚实的本构依据和关键输入。这种从“原子过程揭示”到“宏观规律提炼”的研究范式,弥补了宏观连续介质力学中唯象准则物理机制不清的不足,从而推动了金属层裂研究由原子过程揭示向跨尺度建模衔接的发展。

2.2 宏观尺度

在宏观尺度上,层裂的传统数值模拟方法主要包括有限元法与流体动力学方法,并通常结合相应的损伤演化模型或断裂准则描述材料失效行为。Lin 等^[88]通过构建不同晶粒度高纯铜靶板平板撞击的细观有限元模型,系统研究了晶粒度与加载应力对层裂行为的影响。结果表明,高纯铜的层裂强度随晶粒度增大而提高,而损伤演化速率则呈下降趋势。Czarnota 等^[89]针对强冲击下的弹性-黏塑性材料,提出了一种由孔洞成核与生长控制的动态损伤模型,其中采用概率密度函数来描述材料内部孔洞成核压力的变化,孔洞生长则通过球壳模型来描述。并在 ABAQUS/Explicit 软件中实现平板冲击实验有限元模拟,结果以极高的精度再现了实验测量的自由面速度曲线。Chiu 等^[90]针对具有不同初始孔隙度的多孔延性材料开展了有限变形有限元分析,指出在一定条件下,孔隙结构能够通过削弱应力波传播,从而缓解层裂现象。研究还进一步探讨了冲击速度、初始孔隙度及孔隙形成机制对层裂响应的影响及其潜在机理。Schmelzer 等^[91]提出了一种适用于动态加载条件的热力学一致有限变形宏观损伤模型,将孔隙理想化为代表性体积单元内的厚壁球体,并通过基于物理机制的概率分布函数实现微观孔隙向宏观孔隙度的体积平均。该模型在各向同性位错塑性框架下,引入自由表面能,并在高三轴应力冲击条件下综合考虑微惯性效应、材料可压缩性及自由表面演化,成功描述了高纯铝板冲击实验中的损伤演化过程。Wu 等^[92]结合平板冲击实验与流体动力学模拟,研究了具有可调时间特征的单次与双次冲击加载下的层裂-再压缩动力学行为,揭示了冲击波形及时间间隔对损伤演化与再压缩过程的显著影响,并提出了包含惯性与黏性效应的再压缩模型,实现了对双冲击实验特征的有效再现。总体而言,尽管有限元与流体动力学方法应用广泛,但仍存在收敛性不足、网格畸变显著以及断裂需依赖附加判据等局限性。

除基于孔洞演化的连续损伤模型外,近年来宏观尺度韧性断裂准则逐渐由单一应力或应变指标向同时考虑应力三轴度与 Lode 参数的多轴应力状态描述发展。Wierzbicki 等^[93,94]通过系统研究不同应力状态下金属的塑性变形与断裂行为,建立了考虑压力和 Lode 参数影响的塑性与断裂模型,并进一步发展了修正 Mohr-Coulomb (MMC) 断裂准则,使断裂应变能够同时表征应力三轴度与 Lode 参数对韧性断裂的影响。在此基础上,Lou 等^[95]从孔洞成核、增长及剪切汇合等微观损伤机制出发提出了 DF2012 断裂准则,将等效塑性应变、应力三轴度和最大剪应力分别与不同阶段的延性断裂机制联系起来。随后,Lou 等^[96]通过引入随 Lode 参数变化的应力三轴度截断值发展了 DF2014 准则,从而改善了模型在低应力三轴度及负应力三轴度条件下的断裂预测能力;而进一步提出的 DF2016 准则^[97]通过增加材料参数强化了 Lode 参数对应力状态的调控作用,使模型能够描述从剪切断裂到平衡双轴拉伸断裂的更宽范围应力状态。Mohr 和 Marcadet^[98]提出了具有微观力学启发的 Hosford-Coulomb 断裂准则,通过引入应力状态和材料各向异性,提高了低应力三轴度条件下延性断裂的预测能力。上述模型的发展表明,宏观韧性断裂准则正逐步由传统的单参数经验判据向应力三轴度-Lode 参数耦合以及微观损伤机制启发的断裂准则演进,为复杂动态加载条件下金属层裂损伤的宏观描述提供了更加完善的理论基础。

除上述方法外,近年来相场法与近场动力学等新兴数值方法逐渐应用于层裂问题研究。相场 (Phase Field, PF) 方法基于 Griffith 断裂能理论构建体系自由能^[99],并通过变分原理描述裂纹演化过程,从而将断裂问题转化为能量最小化问题^[100]。与传统方法相比,该方法无需额外断裂判据即可自发模拟裂纹的萌生、生长路径及其相互作用,因而具有较强的预测能力^[101-103]。同时,借助 Γ 收敛理论对裂纹面的正则化处理^[104],相场模型有效缓解了传统断裂模拟中的网格依赖与收敛性问题,并利用相场序参量对裂纹面进行隐式表征,从而无需显式追踪复杂裂纹的扩展路径^[105]。Zhang 等^[106]基于 PF-CZM 并结合弹塑性流体动力学本构模型开展层裂模拟,其对平板撞击自由面速度的预

测与实验结果吻合良好，且表现出较好的网格独立性。进一步地，Zhang 等^[107]提出统一的双相场理论，用于耦合描述层裂与绝热剪切带两类断裂模式，在无需附加判据的条件下实现了不同加载路径下断裂类型的自发演化，并能够刻画复杂多裂纹分布特征。Han 等^[108]发展了 Gurson 型相场模型，将孔洞演化方程与相场方法相结合，并考虑压力相关体积模量及惯性效应，实现了三维高速冲击条件下延性金属孔洞演化与层裂损伤模拟，揭示了侧向及边缘稀疏效应对复杂层裂模式形成的影响机制，如图 9 所示。尽管相场方法在层裂模拟中展现出良好潜力，但其受限于内在特征长度参数，通常需要高密度网格以保证收敛性，计算成本较高，且相场驱动力与微孔洞演化之间的物理联系尚不明确，仍需进一步研究。

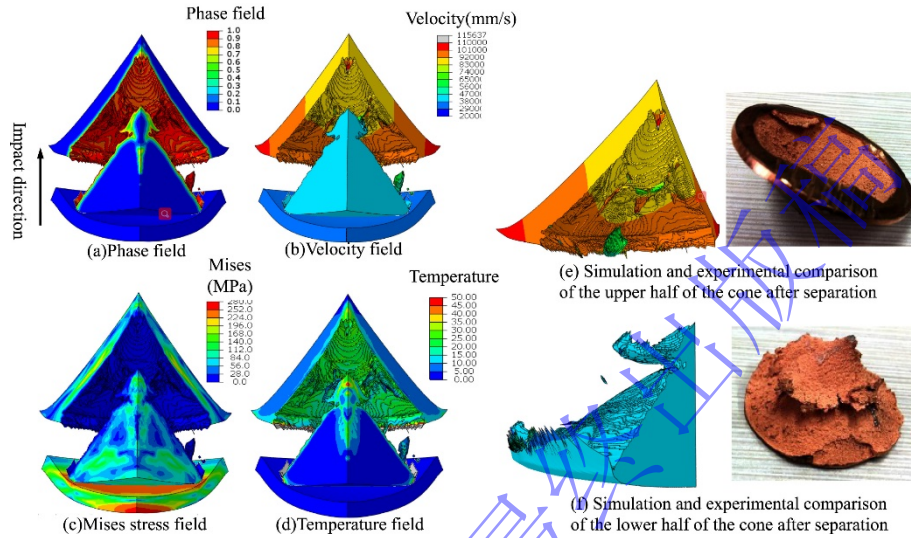


图 9 三维锥形靶层裂的 Gurson 型相场模拟^[108]

Fig.9 Gurson-type phase-field simulation of spallation in a three-dimensional conical target^[108]

近场动力学(Peridynamics, PD)方法最早由 Silling 提出^[109,110]，通过将经典连续介质力学中的偏微分方程转化为积分形式，消除了位移场空间导数，从而天然适用于处理不连续问题。该方法通过键水平失效准则直接控制裂纹的萌生与生长，无需显式追踪裂纹和对尖端特殊处理^[111-113]；同时，其无网格特性使其在大变形及强损伤问题中具有显著优势，因此在层裂模拟中具有良好的应用前景。Silling 等^[114]基于态型近场动力学提出考虑晶粒内失效时间依赖性的模型，并结合电子背散射衍射数据引入晶粒形貌与晶格取向，分析了增材制造 304L 不锈钢在高速拉伸破坏中的微结构效应。在此基础上，Mitchell 等^[115]进一步发展了基于蒙特卡罗方法与两点相关函数的微结构重建技术，用于表征增材制造金属的非均匀组织特征并进行近场动力学离散化。然而，上述研究主要关注晶粒塑性各向异性对层裂响应的影响，而对损伤演化过程中微孔洞的成核、生长及汇合机制考虑不足，仍有待进一步完善与发展。近期，Wang 等^[116]提出了一种键修正近场动力学框架，用于模拟冲击载荷下延性金属的层裂行为，如图 10 所示。该框架通过引入 Monaghan 型人工黏性抑制冲击波传播中的数值振荡，并耦合了 Johnson-Cook 强度模型与 Mie-Grüneisen 状态方程以描述有限变形下的热弹黏塑性响应。同时，将孔洞成核-长大模型嵌入近场动力学体系，并建立了基于孔隙度的键失效准则，实现了微孔洞演化与宏观层裂面形成的直接关联。该模型成功再现了铜平板撞击实验中的自由面速度历史，并准确预测了层裂强度随应变率的幂律增长关系，为极端条件下金属层裂的模拟提供了一套具备物理基础与计算稳健性的统一框架。

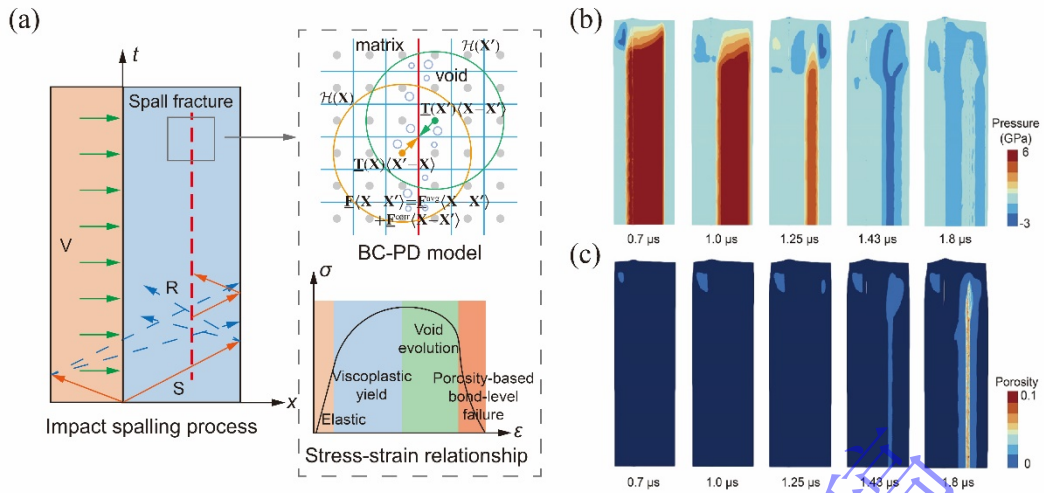


图 10 (a)延性金属层裂的键修正近场动力学框架及平板冲击层裂模拟中(b)压力与(c)孔隙度的演化^[116]

Fig.10 (a) A bond-corrected peridynamic framework for spall fracture in ductile metals, and the evolution of (b) pressure and (c) porosity in plate impact spallation simulations^[116]

3 延性金属层裂的跨尺度耦合

随着计算力学的不断发展,针对金属层裂行为的微观与宏观数值模拟已日趋成熟。然而,层裂行为本质上是一个涉及微观缺陷演化与宏观动力学响应的跨尺度复杂物理过程。单一尺度的模拟方法在分析这一问题时表现出显著的局限性:一方面,以分子动力学(MD)为代表的微观模拟虽然能够从底层揭示位错生长、孔洞成核及晶界失效等微观机制,但在空间尺度上通常局限于百纳米量级,时间跨度亦难以突破微秒量级,导致其模拟结果与宏观实验之间存在较大的数量级差异^[72,117];另一方面,宏观数值方法虽能有效处理工程尺度的冲击响应,但往往难以从物理本质上解释材料内部微观结构对损伤演化的驱动机理。因此,跨尺度建模的核心在于建立微观损伤机制与宏观本构响应之间的有效联系。目前主要形成两类:一方面通过多尺度的粗粒化分子动力学

(CGMD)从细观尺度的模拟缩小分子动力学(MD)预测与宏观实验观测之间的时空尺度差距;另一方面通过串行耦合策略,利用关键参数传递方法,搭建起微观与宏观连接的桥梁。

3.1 多尺度原子模拟方法

在 Robert 和 Jeremy^[118]开发的粗粒化分子动力学框架上, Avinash M. Dongare^[119]进一步提出准粗粒化分子动力学(QCGD),并将其成功应用于研究细观尺度下的金属层裂损伤。近十几年该模拟方法已广泛应用于揭示细观尺度金属层裂的演化机制, Chen 等^[120]使用 CGMD 方法研究了单晶铜的微层裂行为,提出了层裂强度对液态铜应变率的依赖性,如图 11(a)所示。对于多晶金属的研究, QCGD 方法的核心优势在于可以将晶粒尺寸从纳米(nm)尺度拓宽到微米(μ m)尺度,显著弥补传统 MD 方法在空间跨度上的局限性,从而实现了对大尺寸多晶组织层裂行为的有效捕捉。 Garvit Agarwal 等^[121]使用 QCGD 方法通过研究晶粒尺寸、冲击脉冲和系统尺寸对金属冲击响应和层裂失效的影响,展示了该方法在揭示微观结构细观演化方面的能力,如图 11(b)所示。 Sergey Galitskiy 和 Avinash M. Dongare^[122]将双温度模型(TTM)与 QCGD 方法相结合,将传统的 MD-TTM 模拟扩展至介观尺度;该模型不仅成功捕捉到了实验观测中的层裂后损伤演化行为,同时完整保留了孔洞成核与坍塌的原子尺度特征。 Wang 等^[123]在具有固-固相变特性的金属中对 QCGD 方法进行了严格验证,并进一步阐明了层裂强度随晶粒尺寸变化的普遍规律,这些研究的核心是通过粗粒化描述直接扩大原子模型的可计算时空尺度而实现多尺度模拟。

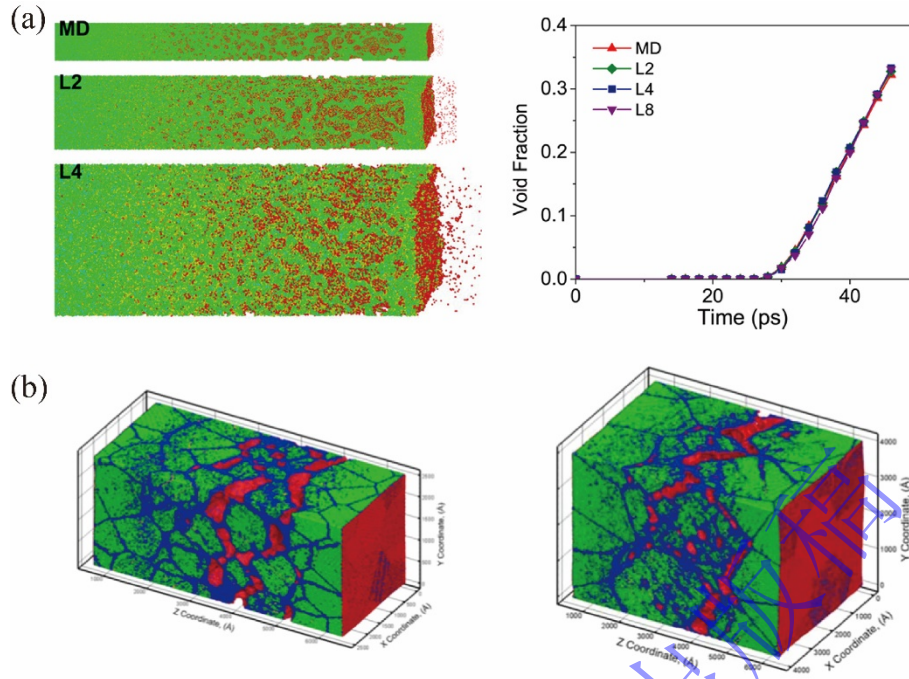


图 11 粗粒化分子动力学方法在细观尺度层裂模型中的应用: (a)对应于 MD 和 CGMD 模拟的单晶铜微层裂现象对比以及孔隙度演化趋势^[113]; (b)对应于 100 纳米(左)以及 200 纳米(右)晶粒尺寸的多晶铝冲击响应^[121]

Fig.11 The application of Coarse-Grained Molecular Dynamics (CGMD) in mesoscale spallation modeling: (a) Comparison of micro-spallation phenomena and porosity evolution trends in single-crystal copper between MD and CGMD simulations^[113]; (b) Shock response of polycrystalline aluminum corresponding to grain sizes of 100 nm (left) and 200 nm (right)^[121]

3.2 串行跨尺度耦合

与通过粗粒化直接扩大计算尺度的多尺度方法不同,串行跨尺度耦合并不要求在同一计算框架内同时解析不同尺度,而是首先利用原子模拟获得具有明确物理意义的微观机制和参数,再将其作为状态变量、临界判据或本构参数传递至宏观模型。因此,参数选择是实现跨尺度耦合的关键:所传递参数既应能够通过原子尺度模拟或实验表征进行定量获得,又应具有明确的动力学意义,并能够以状态变量或本构参数的形式嵌入宏观模型。Sui 等^[38]和 Lin 等^[124]分别针对层裂过程中孔洞成核与生长两个关键阶段,构建了原子尺度信息驱动的多尺度预测模型,如图 12(a)和(b)所示。Sui 等^[38]基于空位团簇诱导位错发射机制建立了位错发射能量判据,实现了层裂损伤萌生阈值及层裂强度的预测;Lin 等^[124]进一步利用 NEB 原子模拟建立了局部应力张量与位错成核能垒之间的定量关系,并将其嵌入孔洞生长模型,构建了适用于 FCC 金属的多尺度层裂预测框架。两项工作揭示了空位团簇激活、位错发射及孔洞生长等微观机制对层裂强度的控制作用,将成核阈值、位错成核能垒及孔洞生长参数等微观信息转化为宏观损伤模型的输入,从而建立微观机制与宏观层裂强度之间的定量联系,为动态损伤实验设计、参数优化及结果解释提供了重要理论指导。Huang 等^[125]针对多晶 MgAl_2O_4 透明陶瓷冲击损伤问题,建立了基于分子动力学校准的键基近场动力学模型。如图 12(c)所示,该模型将原子尺度获得的材料响应参数用于 PD 模型标定,不仅能够再现实验观测到的层裂与失效波传播过程,还揭示了晶粒、晶界对宏观损伤演化的影响,阐明了微观结构对宏观损伤演化的控制作用。该研究表明,MD-PD 耦合能够在保留微观结构信息的同时,将模拟尺度扩展至连续介质尺度,为复杂微结构材料的冲击损伤预测提供了可行路径。

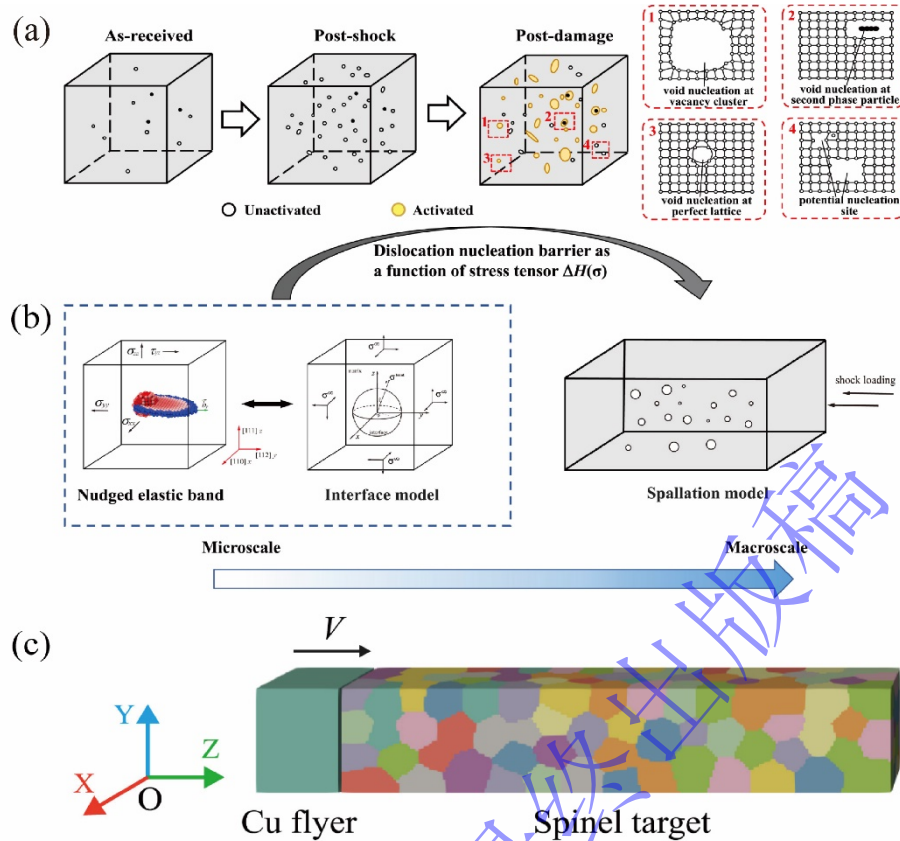


图 12 基于微观物理机制的层裂跨尺度耦合框架：(a)和(b)对应于孔洞成核生长模型嵌入宏观模拟^[38,124]，(c)对应于耦合晶界断裂参数的键基近场动力学模型^[125]

Fig.12 Multi-scale coupling framework for spallation based on microscopic physical mechanisms: (a) and (b) represent the embedding of void nucleation and growth models into macroscopic simulations ^[38,124]; (c) corresponds to the bond-based peridynamic model coupled with grain boundary fracture parameters ^[125]

总体来看，跨尺度层裂耦合的路径主要分为自下而上的尺度拓展与跨尺度的信息传递。前者通过粗粒化方法削减自由度，在保留原子级损伤机制的前提下扩展时空模拟范围；后者则聚焦于参数跨尺度映射与物理机制耦合，将原子模拟得到的成核阈值、位错能垒、孔洞生长参数及材料本构关系引入宏观模型。在现有串行跨尺度研究中，跨尺度层裂模型普遍以孔洞成核与生长等微观损伤机制作为尺度间的耦合桥梁，这是由于孔洞演化是层裂损伤在不同尺度上的共性物理过程。基于该机制，现有研究主要集中于单晶金属层裂行为的跨尺度预测，多晶材料中的晶界、晶粒取向、第二相及缺陷空间分布等真实微观结构因素尚未得到充分考虑；同时，不同尺度模型之间所传递的参数仍以临界应力、成核能垒、孔隙度及等效本构参数等标量变量为主，对孔洞形貌、空间分布及孔洞集体相互作用等高阶信息的跨尺度传递仍较为有限。随着原子模拟、连续介质模型和实验表征技术的不断发展，耦合微观损伤机制的跨尺度金属层裂模型已成为当前研究热点，也是实现层裂行为精准预测和指导实验设计的重要发展方向。

4 总结与展望

本文系统综述了延性金属层裂过程中孔洞成核、生长与汇合机制及其多尺度数值模拟研究进展。总体而言，层裂行为可归结为微孔洞演化主导的跨尺度失效过程。现有研究已从早期基于第二相粒子诱导的非均匀成核模型，发展至涵盖均匀成核、位错发射及空位聚集等机制的多层次理论框架；在孔洞生长方面，逐步明确了黏塑性、惯性及应变率效应在不同阶段的主导作用；在孔洞汇合方面，基于单胞模型的极限载荷理论揭示了局部化变形与损伤失稳之间的内在联系。与此同时，分子动力学方法从原子尺度揭示了层裂的本征机制，宏观数值方法实现了工程尺度预测，而相场法与近场动

力学等新兴方法在处理复杂裂纹演化方面展现出良好潜力。多尺度建模方面, 基于粗粒化与参数传递的方法为连接微观机制与宏观响应提供了重要途径。

尽管上述研究在不同层面上显著推进了对金属层裂机制的认识, 但从整体上看, 现有理论模型与实验之间仍存在一定程度的割裂, 尚未形成统一且具有强预测能力的描述框架。具体而言, 当前孔洞成核模型多建立在理想化微结构假设之上, 对真实材料中复杂的晶界网络、多相分布及初始缺陷状态的刻画仍显不足, 这在一定程度上限制了模型在工程材料中的适用性。同时, 在极端应变率条件下, 材料内部呈现出显著的非平衡特征, 位错动力学、声子拖曳及热效应等机制相互耦合, 其对孔洞演化的协同影响尚缺乏统一而清晰的理论描述。进一步地, 随着损伤演化进入中后期阶段, 孔洞之间的相互作用及集体效应逐渐成为主导因素, 而现有模型多侧重于单孔或稀疏孔洞情形, 对高孔隙度条件下的协同演化与失稳机制关注不足。此外, 近年来发展起来的相场法与近场动力学等新兴数值方法, 尽管在处理裂纹萌生与生长方面具有明显优势, 但其模型参数与微观物理机制之间的对应关系仍不够明确, 物理可解释性有待进一步加强。最后, 多尺度建模方面仍主要依赖由微观向宏观的单向参数传递, 缺乏能够反映多尺度信息反馈与耦合演化的统一框架, 这在本质上制约了对层裂全过程的准确刻画。

面向上述问题, 未来研究需在物理机制深化与建模方法统一两个层面协同推进。一方面, 应突破理想化假设, 引入晶界、多相及初始缺陷等真实微结构信息, 发展更具物理基础的孔洞成核模型; 同时, 针对超高应变率下的非平衡特征, 有必要构建以位错动力学为核心并耦合声子拖曳与温度效应的本构关系。另一方面, 随着损伤演化进入中后期, 孔洞间相互作用与集体效应逐渐主导失效过程, 亟需建立统一的多孔耦合演化理论。在数值方法方面, 应加强相场法与近场动力学等数值方法同微观机制模型之间的联系, 明确参数的物理来源, 以提升模型的可解释性与预测能力; 同时, 多尺度建模有待由单向参数传递向双向耦合框架发展, 从而更真实地刻画微观缺陷演化与宏观响应之间的相互作用。此外, 复杂加载路径(如多次冲击与热-力耦合)对层裂行为的影响仍需进一步系统研究。通过实验、理论与数值方法的融合, 有望实现对金属层裂过程的统一描述与高精度预测。

参考文献

- [1] NELSON R W. Low-yield earth-penetrating nuclear weapons [J]. *Science and Global Security*, 2002, 10(1): 1-20.
- [2] BETTI R, HURRICANE O A. Inertial-confinement fusion with lasers [J]. *Nature Physics*, 2016, 12(5): 435-448.
- [3] HU S X, COLLINS L A, BOEHLY T R, et al. A review on ab initio studies of static, transport, and optical properties of polystyrene under extreme conditions for inertial confinement fusion applications [J]. *Physics of Plasmas*, 2018, 25(5): 056306.
- [4] RAMESH K T, HOGAN J D, KIMBERLEY J, et al. A review of mechanisms and models for dynamic failure, strength, and fragmentation [J]. *Planetary and Space Science*, 2015, 107: 10-23.
- [5] EVANS H E. Cracking and spalling of protective oxide layers [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 1989, 120-121: 139-146.
- [6] MEYERS M A, TAYLOR AIMONE C. Dynamic fracture (spalling) of metals [J]. *Progress in Materials Science*, 1983, 28(1): 1-96.
- [7] CURRAN D. Dynamic failure of solids [J]. *Physics Reports*, 1987, 147(5-6): 253-388.
- [8] 黄筑平, 杨黎明, 潘客麟. 材料的动态损伤和失效 [J]. *力学进展*, 1993, 23(4): 433-467.
HUANG Z P, YANG L M, PAN K L. Dynamic damage and failure of materials [J]. *Advances in Mechanics*, 1993, 23(4): 433-467.
- [9] ANTOUN T, CURRAN D R, RAZORENOV S V, et al. *Spall fracture* [M]. New York, NY: Springer New York, 2003.
- [10] KANEL G I. Spall fracture: methodological aspects, mechanisms and governing factors [J].

- International Journal of Fracture, 2010, 163(1-2): 173-191.
- [11] 周洪强, 张凤国, 潘昊, 等. 材料层裂研究的主要进展 [J]. 高压物理学报, 2019, 33(5): 050301-1-050301-20.
- ZHOU H Q, ZHANG F G, PAN H, et al. Main Progress in Research on Material Spalling [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2019, 33(5):050301.
- [12] SUI H, YU L, LIU W, et al. Theoretical models of void nucleation and growth for ductile metals under dynamic loading: A review [J]. Matter and Radiation at Extremes, 2022, 7(1): 018201.
- [13] TIPPER C F. The brittle fracture of metals at atmospheric and sub-zero temperatures [J]. International Materials Reviews, 1957, 2(1): 195-261.
- [14] PUTTICK K E. Ductile fracture in metals [J]. Philosophical Magazine, 1959, 4(44): 964-969.
- [15] COX T B, LOW J R. An investigation of the plastic fracture of AISI 4340 and 18 Nickel-200 grade maraging steels [J]. Metallurgical transactions, 1974, 5(6): 1457-1470.
- [16] GOODS S H, BROWN L M. The nucleation of cavities by plastic deformation [M]//Perspectives in Creep Fracture. Elsevier, 1983: 71-85.
- [17] NEEDLEMAN A. A continuum model for void nucleation by inclusion debonding [J]. Journal of Applied Mechanics, 1987, 54(3): 525-531.
- [18] GURSON A L. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth: Part I—Yield criteria and flow rules for porous ductile media [J]. Journal of Engineering Materials and Technology, 1977, 99(1): 2-15.
- [19] BABOUT L, BRECHET Y, MAIRE E, et al. On the competition between particle fracture and particle decohesion in metal matrix composites [J]. Acta Materialia, 2004, 52(15): 4517-4525.
- [20] CHARLES Y, ESTEVEZ R, BRÉCHET Y, et al. Modelling the competition between interface debonding and particle fracture using a plastic strain dependent cohesive zone [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2010, 77(4): 705-718.
- [21] ACHOURI M, GERMAIN G, DAL SANTO P, et al. Experimental characterization and numerical modeling of micromechanical damage under different stress states [J]. Materials & Design, 2013, 50: 207-222.
- [22] NOELL P J, SILLS R B, BENZERGA A A, et al. Void nucleation during ductile rupture of metals: A review [J]. Progress in Materials Science, 2023, 135: 101085.
- [23] ZHAO F Q, ZHOU T ting, HE A, et al. A coupling model of melting and damage evolution in the spallation of tin under shock loading [J]. Journal of Applied Physics, 2025, 138(8): 085901.
- [24] SARMAH A, JAIN M K. Multi-scale modeling of decohesion characteristics of second phase particles from the matrix in uniaxial tension in a high strength aluminum alloy [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2024, 301: 110013.
- [25] PEDRAZAS N A, WORTHINGTON D L, DALTON D A, et al. Effects of microstructure and composition on spall fracture in aluminum [J]. Materials Science and Engineering: A, 2012, 536: 117-123.
- [26] RAJ R, ASHBY M F. Intergranular fracture at elevated temperature [J]. Acta Metallurgica, 1975, 23(6): 653-666.
- [27] REINA C, MARIAN J, ORTIZ M. Nanovoid nucleation by vacancy aggregation and vacancy-cluster coarsening in high-purity metallic single crystals [J]. Physical Review B, 2011, 84(10): 104117.
- [28] MEYERS M A, TRAVIRATANA S, LUBARDA V A, et al. The role of dislocations in the growth of nanosized voids in ductile failure of metals [J]. Jom, 2009, 61(2): 35-41.
- [29] BRINGA E M, TRAVIRATANA S, MEYERS M A. Void initiation in fcc metals: Effect of loading orientation and nanocrystalline effects [J]. Acta Materialia, 2010, 58(13): 4458-4477.

- [30] TANG Y, BRINGA E M, REMINGTON B A, et al. Growth and collapse of nanovoids in tantalum monocrystals [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(4): 1354-1372.
- [31] LUBARDA V A, SCHNEIDER M S, KALANTAR D H, et al. Void growth by dislocation emission [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(6): 1397-1408.
- [32] LUBARDA V A. Emission of dislocations from nanovoids under combined loading [J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27(2): 181-200.
- [33] WILKERSON J W, RAMESH K T. A closed-form criterion for dislocation emission in nano-porous materials under arbitrary thermomechanical loading [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2016, 86: 94-116.
- [34] WILLIS J R, BULLOUGH R. The interaction between a void and a dislocation loop [M]//*Voids formed by irradiation of reactor materials*. 1971.
- [35] AHN D C, SOFRONIS P, MINICH R. On the micromechanics of void growth by prismatic-dislocation loop emission [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2006, 54(4): 735-755.
- [36] AHN D C, SOFRONIS P, KUMAR M, et al. Void growth by dislocation-loop emission [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(6): 063514.
- [37] SUI H, YU L, LIU W, et al. Three dimensional dislocation-loop emission criterion for void growth of ductile metals [J]. *International Journal of Plasticity*, 2020, 131: 102746.
- [38] SUI H, LIU W, ZHANG Y, et al. Multi-scale spallation model for single-crystal ductile metals incorporating microscopic mechanism of void nucleation [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2024, 183: 105520.
- [39] HILL R. The mathematical theory of plasticity [M]. Oxford University Press Oxford, 1998.
- [40] BALL J M. Discontinuous equilibrium solutions and cavitation in nonlinear elasticity [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1982, 306(1496): 557-611.
- [41] HUANG Y, HUTCHINSON J W, TVERGAARD V. Cavitation instabilities in elastic-plastic solids [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1991, 39(2): 223-241.
- [42] MCCLINTOCK F A. A Criterion for Ductile Fracture by the Growth of Holes [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1968, 35(2): 363-371.
- [43] RICE J R, TRACEY D M. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1969, 17(3): 201-217.
- [44] TVERGAARD V, NEEDLEMAN A. Analysis of the cup-cone fracture in a round tensile bar [J]. *Acta Metallurgica*, 1984, 32(1): 157-169.
- [45] BUDIANSKY B, HUTCHINSON J W, SLUTSKY S. Void growth and collapse in viscous solids [M]//*Mechanics of solids*. Pergamon, 1982: 13-45..
- [46] NEMAT-NASSER S, HORI M. Void collapse and void growth in crystalline solids [J]. *Journal of Applied Physics*, 1987, 62(7): 2746-2757.
- [47] HAGHI M, ANAND L. Analysis of strain-hardening viscoplastic thick-walled sphere and cylinder under external pressure [J]. *International Journal of Plasticity*, 1991, 7(3): 123-140.
- [48] KNOWLES J K, JAKUB M T. Finite dynamic deformations of an incompressible elastic medium containing a spherical cavity [J]. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1965, 18(5): 367-378.
- [49] CARROLL M M, HOLT A C. Static and dynamic pore-collapse relations for ductile porous materials [J]. *Journal of Applied Physics*, 1972, 43(4): 1626-1636.
- [50] JOHNSON J N. Dynamic fracture and spallation in ductile solids [J]. *Journal of Applied Physics*, 1981, 52(4): 2812-2825.
- [51] WU X Y, RAMESH K T, WRIGHT T W. The dynamic growth of a single void in a viscoplastic material

- under transient hydrostatic loading [J]. *J. Mech. Phys. Solids*, 2003.
- [52] WU X Y, RAMESH K T, WRIGHT T W. The effects of thermal softening and heat conduction on the dynamic growth of voids [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2003, 40(17): 4461-4478.
- [53] WU X Y, RAMESH K T, WRIGHT T W. The coupled effects of plastic strain gradient and thermal softening on the dynamic growth of voids [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2003, 40(24): 6633-6651.
- [54] ORTIZ M, MOLINARI A. Effect of strain hardening and rate sensitivity on the dynamic growth of a void in a plastic material [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1992, 59(1): 48-53.
- [55] MOLINARI A, WRIGHT T W. A physical model for nucleation and early growth of voids in ductile materials under dynamic loading [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(7): 1476-1504.
- [56] WILKERSON J W, RAMESH K T. Unraveling the anomalous grain size dependence of cavitation [J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(21): 215503.
- [57] CZARNOTA C, MERCIER S, MOLINARI A. Modelling of nucleation and void growth in dynamic pressure loading, application to spall test on tantalum [J]. *International Journal of Fracture*, 2006, 141(1-2): 177-194.
- [58] MOLINARI A, MERCIER S. Micromechanical modelling of porous materials under dynamic loading [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(7): 1497-1516.
- [59] WILKERSON J W, RAMESH K T. A dynamic void growth model governed by dislocation kinetics [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 70: 262-280.
- [60] WILKERSON J W. On the micromechanics of void dynamics at extreme rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2017, 95: 21-42.
- [61] SCHMELZER N J, LIEBERMAN E J, CHEN N, et al. Quantifying power partitioning during void growth for dynamic mechanical loading in reduced form [J]. *International Journal of Plasticity*, 2025, 188: 104314.
- [62] PINEAU A, BENZERGA A A, PARDOEN T. Failure of metals I: Brittle and ductile fracture [J]. *Acta Materialia*, 2016, 107: 424-483.
- [63] THOMASON P F. A theory for ductile fracture by internal necking of cavities [J]. *J. Inst. Met.*, 1968, 96(360).
- [64] BROWN L M, EMBURY J D. The initiation and growth of voids at second phase particles [C]//*Proceedings of the 3rd International Conference on the Strength of Metals and Alloys*. London: Institute of Metals, 1973: 164-169.
- [65] THOMASON P F. Three-dimensional models for the plastic limit-loads at incipient failure of the intervoid matrix in ductile porous solids [J]. *Acta Metallurgica*, 1985, 33(6): 1079-1085.
- [66] BENZERGA A A, LEBLOND J B. Effective Yield Criterion Accounting for Microvoid Coalescence [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2014, 81(3): 031009.
- [67] MOLINARI A, JACQUES N, MERCIER S, et al. A micromechanical model for the dynamic behavior of porous media in the void coalescence stage [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2015, 71: 1-18.
- [68] BENZERGA A. Micromechanics of coalescence in ductile fracture [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2002, 50(6): 1331-1362.
- [69] PARDOEN T, HUTCHINSON J W. An extended model for void growth and coalescence [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(12): 2467-2512.
- [70] TONKS D L, ZUREK A K, THISSELL W R. Coalescence rate model for ductile damage in metals [J]. *Journal de Physique IV (Proceedings)*, 2003, 110: 893-898.

- [71] 张凤国, 周洪强, 胡晓棉, 等. 强动载作用下孔洞汇合对延性金属层裂损伤演化过程的影响 [J]. 爆炸与冲击, 2016, 36(5): 596-602.
ZHANG F G, ZHOU H Q, HU X M, et al. Influence of void coalescence on spall evolution of ductile polycrystalline metal under dynamic loading [J]. Explosion and Shock Waves, 2016, 36(5): 596-602.
- [72] 王嘉楠, 伍鲍, 何安民, 等. 强冲击下金属材料动态损伤与破坏的分子动力学模拟研究进展 [J]. 高压物理学报, 2021, 35(4): 4-17.
WANG J N, WU B, HE A M, et al. Research Progress on Dynamic Damage and Failure of Metal Materials under Shock Loading with Molecular Dynamics Simulation [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2021, 35(4): 4-17.
- [73] WANG X X, HE A M, ZHOU T T, et al. Spall damage in single crystal tin under shock wave loading: A molecular dynamics simulation [J]. Mechanics of Materials, 2021, 160: 103991.
- [74] WANG K, ZHANG F, HE A, et al. An atomic view on spall responses of release melted lead induced by decaying shock loading [J]. Journal of Applied Physics, 2019, 125(15): 155107.
- [75] ZHU Y, QIAN S, QIU L, et al. Wave-partition-governed dual-site spallation in single crystals [J]. Advanced Science, 2026, 13(9): e15623.
- [76] JIANG D D, SHAO J L, WU B, et al. Sudden change of spall strength induced by shock defects based on atomistic simulation of single crystal aluminum [J]. Scripta Materialia, 2022, 210: 114474.
- [77] BRINGA E M, ROSOLANKOVA K, RUDD R E, et al. Shock deformation of face-centred-cubic metals on subnanosecond timescales [J]. Nature Materials, 2006, 5(10): 805-809.
- [78] DONGARE A M, RAJENDRAN A M, LAMATTINA B, et al. Atomic scale studies of spall behavior in nanocrystalline Cu [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 108(11): 113518.
- [79] MACKENCHERY K, VALISETTY R R, NAMBURU R R, et al. Dislocation evolution and peak spall strengths in single crystal and nanocrystalline Cu [J]. Journal of Applied Physics, 2016, 119(4): 044301.
- [80] XIANG M, HU H, CHEN J. Spalling and melting in nanocrystalline Pb under shock loading: Molecular dynamics studies [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113(14): 144312.
- [81] ZHOU T T, HE A M, WANG P, et al. Spall damage in single crystal Al with helium bubbles under decaying shock loading via molecular dynamics study [J]. Computational Materials Science, 2019, 162: 255-267.
- [82] ZHOU T, ZHANG W, ZHAO F, et al. The spallation characteristics of polycrystalline aluminum with helium bubbles under a wide range of shock stresses [J]. Journal of Applied Physics, 2025, 137(3): 035901.
- [83] ZHOU T, ZHAO F, HE A, et al. Characteristics and mechanisms for a new damage region near the loading side of polycrystalline aluminum with helium bubbles under strongly decaying shock waves [J]. Matter and Radiation at Extremes, 2026, 11(1): 017605.
- [84] WANG J, WU F, WANG P, et al. Double-shock-induced spall and recompression processes in copper [J]. Journal of Applied Physics, 2020, 127(13): 135903.
- [85] WANG J, WU B, WU F, et al. Spall and recompression processes with double shock loading of polycrystalline copper [J]. Mechanics of Materials, 2022, 165: 104194.
- [86] ZHANG Q, HE A, ZHAO F, et al. Understanding the spall behaviors of single crystalline aluminum under double decaying shock loadings: Atomistic simulations and theoretical models [J]. European Journal of Mechanics - A/Solids, 2024, 105: 105237.
- [87] WANG X X, ZHOU T T, SUN Z Y, et al. Micro-spall damage and subsequent re-compaction of release melted lead under shock loading [J]. Computational Materials Science, 2022, 203: 111178.
- [88] LIN Q, XIE P C, HU J B, et al. Numerical simulation on dynamic damage evolution of high pure copper

- with different grain sizes [J]. *Acta Physica Sinica*, 2021, 70(20): 204601.
- [89] CZARNOTA C, JACQUES N, MERCIER S, et al. Modelling of dynamic ductile fracture and application to the simulation of plate impact tests on tantalum [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(4): 1624-1650.
- [90] CHIU E, NEEDLEMAN A, OSOVSKI S, et al. Mitigation of spall fracture by evolving porosity [J]. *Mechanics of Materials*, 2023, 184: 104710.
- [91] SCHMELZER N J, LIEBERMAN E J, GRAY G T, et al. Thermodynamically consistent and microstructure informed porosity-based dynamic ductile damage model [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2025, 205: 106336.
- [92] WU F, LI X, DUAN Z, et al. Double-shock induced spall damage and recompression in tin: experimental and modeling insights into dynamic damage evolution [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2026, 210: 105595.
- [93] BAI Y, WIERZBICKI T. A new model of metal plasticity and fracture with pressure and lode dependence [J]. *International Journal of Plasticity*, 2008, 24(6): 1071-1096.
- [94] BAI Y, WIERZBICKI T. Application of extended mohr–coulomb criterion to ductile fracture [J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 161(1): 1-20.
- [95] LOU Y, HUH H, LIM S, et al. New ductile fracture criterion for prediction of fracture forming limit diagrams of sheet metals [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2012, 49(25): 3605-3615.
- [96] LOU Y, YOON J W, HUH H. Modeling of shear ductile fracture considering a changeable cut-off value for stress triaxiality [J]. *International Journal of Plasticity*, 2014, 54: 56-80.
- [97] LOU Y, CHEN L, CLAUSMEYER T, et al. Modeling of ductile fracture from shear to balanced biaxial tension for sheet metals [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2017, 112: 169-184.
- [98] MOHR D, MARCADET S J. Micromechanically-motivated phenomenological hosford–coulomb model for predicting ductile fracture initiation at low stress triaxialities [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2015, 67-68: 40-55.
- [99] GRIFFITH A A. VI. The phenomena of rupture and flow in solids [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 1921, 221(582-593): 163-198.
- [100] FRANCFORT G A, MARIGO J J. Revisiting brittle fracture as an energy minimization problem [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46(8): 1319-1342.
- [101] MIEHE C, HOFACKER M, WELSCHINGER F. A phase field model for rate-independent crack propagation: Robust algorithmic implementation based on operator splits [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2010, 199(45-48): 2765-2778.
- [102] WU J Y. A unified phase-field theory for the mechanics of damage and quasi-brittle failure [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, 103: 72-99.
- [103] XU W, YU H, ZHANG J, et al. Phase-field method of crack branching during SC-CO₂ fracturing: A new energy release rate criterion coupling pore pressure gradient [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 399: 115366.
- [104] BOURDIN B, FRANCFORT G A, MARIGO J J. Numerical experiments in revisited brittle fracture [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(4): 797-826.
- [105] NGUYEN T T, YVONNET J, BORNERT M, et al. On the choice of parameters in the phase field method for simulating crack initiation with experimental validation [J]. *International Journal of Fracture*, 2016, 197(2): 213-226.
- [106] ZHANG H, PENG H, PEI X yang, et al. A phase-field model for spall fracture [J]. *Journal of Applied Physics*, 2021, 129(12): 125903.

- [107] ZHANG F, PAN H, WANG P, et al. Spallation model coupled with variation of void distribution characteristics and its application [J]. *Acta Physica Sinica*, 2026, 75(3).
- [108] HAN H, WANG T, HUANG G, et al. Study of the dynamic impact spalling of ductile materials based on Gurson-type phase-field model [J]. *International Journal of Plasticity*, 2024, 181: 104106.
- [109] SILLING S A. Reformulation of elasticity theory for discontinuities and long-range forces [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(1): 175-209.
- [110] SILLING S A, EPTON M, WECKNER O, et al. Peridynamic states and constitutive modeling [J]. *Journal of Elasticity*, 2007, 88(2): 151-184.
- [111] SILLING S A, ASKARI E. A meshfree method based on the peridynamic model of solid mechanics [J]. *Computers & Structures*, 2005, 83(17-18): 1526-1535.
- [112] FOSTER J, SILLING S A, CHEN W. An energy based failure criterion for use with peridynamic states [J]. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2011, 9(6): 675-688.
- [113] WANG N, YU H, HUANG H, et al. A generalized peridynamic model based on seth-hill bond-strain measures for mixed-mode fracture [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2026, 127(7): e70316.
- [114] SILLING S A, ADAMS D P, BRANCH B A. Mesoscale model for spall in additively manufactured 304l stainless steel [J]. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2023, 21(3): 49-67.
- [115] MITCHELL J A, SILLING S A, CHIU E, et al. Modeling additively manufactured metallic microstructures for dynamic response [J]. *Journal of Peridynamics and Nonlocal Modeling*, 2023, 5(4): 497-520.
- [116] WANG N, MA F, ZHU Y, et al. A bond-corrected peridynamic framework for shock-induced spall fracture in ductile metals [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2026, 461: 119247.
- [117] 邓小良, 李博, 汤观晴, 等. 分子动力学方法在金属材料动态响应研究中的应用 [J]. *高压物理学报*, 2019, 33(3): 030103.
DENG X L, LI B, TANG G Q, et al. Application of molecular dynamics simulation to dynamic response of metals [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2019, 33(3): 030103.
- [118] RUDD R E, BROUGHTON J Q. Coarse-grained molecular dynamics and the atomic limit of finite elements [J]. *Physical Review B*, 1998, 58(10): R5893-R5896.
- [119] DONGARE A M. Quasi-coarse-grained dynamics: modelling of metallic materials at mesoscales [J]. *Philosophical Magazine*, 2014, 94(34): 3877-3897.
- [120] CHEN H. Constructing continuum-like measures based on a nonlocal lattice particle model: Deformation gradient, strain and stress tensors [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2019, 169: 177-186.
- [121] AGARWAL G, VALISETTY R R, NAMBURU R R, et al. The Quasi-Coarse-Grained Dynamics Method to Unravel the Mesoscale Evolution of Defects/Damage during Shock Loading and Spall Failure of Polycrystalline Al Microstructures [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 12376.
- [122] GALITSKIY S, DONGARE A M. Modeling the damage evolution and recompression behavior during laser shock loading of aluminum microstructures at the mesoscales [J]. *Journal of Materials Science*, 2021, 56(6): 4446-4469.
- [123] WANG H, LI R, GAO Y, et al. On the grain size effects of the spallation in Pb by quasi-coarse-grained molecular dynamics [J]. *Journal of Applied Physics*, 2024, 135(23): 235104.
- [124] LIN M, SUI H, ZHANG Y, et al. Atomistically-informed modeling of void growth in spallation of FCC metals [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2026, 206: 106410.

- [125] HUANG J, FENG L, ZHANG X, et al. Shock induced damage and failure mechanisms of magnesium aluminate spinel based on an atomistically calibrated bond-based peridynamic model [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2025, 314: 113316.

Physical Mechanisms and Numerical Modeling of Shock-Induced Spallation in

Ductile Metals: From Void Evolution to Multiscale Modeling

WANG Ningtao¹, MA Fangzhe¹, ZHU Yinbo^{1,2}, WANG Pei³, WU Heng'an¹

(1. *State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China University, Hefei 230027, China;*

2. *State Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China;*

3. *State Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China).*

Abstract: Spallation in ductile metals subjected to intense shock loading originates from multiscale damage evolution governed by the nucleation, growth, and coalescence of microvoids. This review presents a comprehensive overview of the theoretical developments and numerical modeling of void-mediated spallation in ductile metals from the perspective of the underlying mesoscale damage mechanisms. First, the evolution of void nucleation theories is examined, highlighting the transition from classical heterogeneous nucleation associated with second-phase particles to multiple competing mechanisms, including homogeneous nucleation, dislocation-mediated nucleation, and vacancy clustering. Next, the development of void growth models is reviewed, tracing their progression from classical cavitation instability theories to dynamic formulations that incorporate viscoplasticity, micro-inertia, and strain-rate effects. The theoretical descriptions of void coalescence are then summarized, with particular emphasis on localized plastic deformation and damage-induced instability leading to fracture. Building upon these fundamental mechanisms, the review discusses the application and distinctive capabilities of computational approaches for spallation modeling, including molecular dynamics, the finite element method, hydrocodes, phase-field methods, and peridynamics. Particular attention is devoted to the role of multiscale modeling in bridging microscale void evolution and macroscale spall response. Finally, current challenges and future research directions are discussed, including realistic microstructural characterization, dynamic damage mechanisms under extreme strain-rate loading, collective interactions among multiple voids, and robust multiscale coupling strategies. This review provides a unified perspective on the multiscale physics governing ductile metal spallation and offers guidance for the development of predictive damage models and numerical simulation frameworks for high-strain-rate applications.

Keywords: Metal spallation; Void evolution; Shock loading; Numerical simulation; Multiscale modeling