高压物理学报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

第 27 卷 第 6 期
2013 年 12 月

高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 27, No. 6
Dec., 2013

文章编号:1000-5773(2013)06-0863-09

颗粒金属材料冲击压缩细观数值模拟*

乔 良[1,2],张先锋[1],何 勇[1],史安顺[1,3],张 将[1,4]

(1.南京理工大学智能弹药国防重点学科实验室,江苏南京 210094;
2.北京航天长征飞行器研究所,北京 100076;
3.中国兵器科学研究院烟台分院,山东烟台 264003;
4.中国兵器科学研究院宁波分院,浙江宁波 315103)

摘要:颗粒金属材料的细观特性对其宏观力学性能有着重要影响。为进一步分析颗粒直径、分布、形态、孔隙率等细观特性对宏观冲击响应行为的影响规律,从颗粒金属材料的细观结构入手,经合理简化,建立了能够反映材料细观分布特性的有限元模型。基于 AUTODYN 有限元计算程序,对颗粒金属材料冲击压缩细观行为进行了数值模拟,确定了典型颗粒金属材料冲击 Hugoniot 参数,并与已有的实验结果进行了对比。获取了材料细观特性(颗粒粒径、材料密实度)对材料宏观冲击压缩特性的影响规律,并从细观尺度上获取了材料冲击压缩过程中颗粒冲击变形演化及冲击温升情况。结果表明,数值仿真结果与已有实验数据吻合良好,颗粒金属材料的细观特性对其宏观响应行为有较为显著的影响。

关键词:颗粒金属材料;冲击压缩;细观模型;Hugoniot 参数;数值模拟
中图分类号:O383 **文献标识码**:A

1 引 言

颗粒金属材料是指将一种金属、多种金属或金属与非金属混合物,利用一定的工艺方法(如真空烧结、粉末压实等)结合而形成的具有一定强度、硬度和质量密度的一类功能材料。典型的颗粒金属材料通常由微米或纳米尺度的颗粒组成,具备低密度、一定强度与孔隙度等特性。在冲击载荷作用下,颗粒金属材料的宏观响应行为受控于颗粒形状、尺寸、分布及孔隙率等细观特性,细观尺度上颗粒间的混合、材料的输运由此而产生的温度升高、颗粒熔化等过程直接决定了其冲击宏观压缩特性。这类问题正日益受到中外学者的关注[1]。同时,上述问题也是材料设计和应用的关键技术之一,因此需要对其冲击压缩过程的力学响应,特别是细观特性对其宏观冲击响应行为,进行深入的研究。

国外学者从 20 世纪 80 年代开始对颗粒金属材料的冲击压缩行为进行研究,Thadhani[2]、Boslough[3]从宏观尺度入手,以单质金属材料 Cu、Ni、铝热剂($Al+Fe_2O_3$)及金属混合物 Ni+Al 等作为研究对象,借助温度、压力等瞬态测试系统,就高速飞片冲击下材料的力学响应方面开展了大量研究工作,在获取材料冲击 Hugoniot 参数的同时,也关注冲击前后材料在细观形态上的变化,并建立了高压下材料的物态方程。由于材料冲击压缩通常是高应变率瞬态变化过程,通常只能对材料受冲击前、后的初态和终态进行观测,难以深入研究颗粒金属材料在冲击压缩下的变形演化、塑性流动和冲击温升等

* **收稿日期**:2012-03-06;**修回日期**:2012-05-30
基金项目:国家自然科学基金(10902053);爆炸科学与技术国家重点实验室开放基金(KFJJ10-6M)
作者简介:乔 良(1986—),男,博士,工程师,主要从事战斗部高效毁伤研究. E-mail:lyqiaoliang@hotmail.com
通讯作者:张先锋(1978—),男,副教授,博士生导师,主要从事材料冲击动力学、战斗部高效毁伤研究.
E-mail:lynx@mail.njust.edu.cn

问题，对材料细观特性影响其宏观响应行为有一定局限性。理论和实验均证实：颗粒类型、形态、尺寸、分布、密实度等细观特性都极大地影响着材料的冲击响应特性[4]。因此，采用宏、细观相结合的方法，在细观数值模拟的基础上，建立细观特性与宏观冲击力学响应之间的联系，成为深入研究颗粒金属材料冲击压缩特性行之有效的方法之一。进入 20 世纪 90 年代，随着数值模拟技术的发展，特别是多物质流固耦合算法的不断成熟，使基于离散颗粒细观尺度冲击压缩过程的仿真成为可能。Benson[5-8]利用所开发的多物质欧拉计算程序 RAVEN 对颗粒材料的冲击压缩、混合、变形及温升过程进行了深入的研究。Austin[9-11]优化了细观尺度数值模拟方法，并结合改进的材料冲击本构模型，对Al/Ni颗粒混合物在较高应变率（$>10^5\ s^{-1}$）下的黏塑性变形行为进行了仿真研究，重点考核颗粒尺寸、颗粒形状、体积比等对冲击响应行为的影响结果。Eakin [12-14]、Fredenburg[15]基于 CTH 代码，利用离散粒子模拟（Discrete Particle Simulation）方法，对Al/Ni混合物冲击压缩细观响应行为进行了仿真研究，获得了不同密实度 Al/Ni 混合物的动力学参数。国内学者对材料细观力学行为的研究主要集中于炸药类材料上，周栋等[16-17]、陈鹏万等[18]和 Dai 等[19]基于细观尺度对炸药类含能材料的冲击损伤行为进行了较为深入的研究，其研究成果对颗粒金属材料的细观力学数值模拟研究工作具有较高的参考价值。

本研究从颗粒金属材料细观分布特性入手，建立细观有限元模型，利用动力有限元软件 AUTODYN 的多物质欧拉算法，对其颗粒金属材料细观尺度上的冲击压缩行为进行数值仿真计算。研究了材料的冲击响应、温升及细观形态演化过程，并分析了细观特性（密实度、颗粒粒径）以及冲击速度对材料宏观力学响应的影响规律。

2 细观有限元数值计算模型

结合 Granqvist 对颗粒金属材料的细观特性统计分析结果[20]，颗粒金属材料在细观上的分布特性主要体现为颗粒形态、尺寸、分布特性及孔隙率等。为使数值仿真模型能够更真实地反映颗粒金属的细观特性，在建立有限元模型时主要针对如下几点因素进行简化：

（1）为了简化计算，在计算模型中将材料颗粒形状简化为理想球形；

（2）为着重研究颗粒粒径对材料冲击压缩性能的影响，将其简化为等粒径颗粒；

（3）材料颗粒位置分布满足空间上的随机分布，模型中将其简化为二维平面内的随机分布且颗粒间保证不发生重叠。

2.1 材料细观分布模型的建立

经过上述简化，建立细观颗粒分布模型的过程为，在给定二维平面空间区域内随机填充一定粒径的圆形颗粒。采用如下步骤：首先，利用随机数生成程序生成仿真区域内颗粒圆心初步的位置坐标；其次，加入约束条件，使在给定颗粒粒径 d 的情况下颗粒不发生相互重叠，更新圆心位置坐标为 (x_i, y_i)；最后，将颗粒按照圆心位置坐标 (x_i, y_i) 与粒径 d 填充至仿真区域，直至达到给定的密实度。

本研究以不同粒径金属铜颗粒形成不同密实度的颗粒金属材料为研究对象，研究其冲击压缩过程。为获得材料细观特性密实度（Theoretical Mass Density，TMD）和颗粒粒径 d 对于宏观冲击压缩性能的影响，确定仿真方案为：仿真区域 200 μm×200 μm，建立密实度 40%、50%、63%及粒径为 10、15、20 μm 的细观模型。细观分布模型中颗粒的间隙未填充任何材料，以模拟非密实态颗粒金属材料颗粒间存在的孔隙。细观模型特征参数见表 1。

表 1 Cu 颗粒细观分布模型特征参数
Table 1 Characteristic parameters of meso model distribution for copper particles

TMD	Relative density	Diameter of particles/(μm)	Number of particles
40%	3.56	10	204
		15	91
		20	51
50%	4.50	10	255
		15	113
		20	64
63%	5.70	10	321
		15	143
		20	80

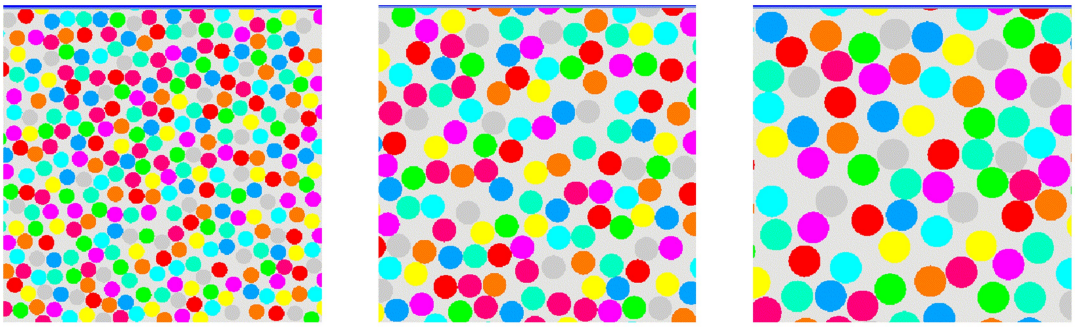
2.2　边界条件及有限元模型

对材料细观分布模型加入如下边界条件:

(1) 选择刚性材料建立刚性墙,并使其保持恒定速度冲击材料上边界面,以模拟瞬态冲击的过程;

(2) 对于未受冲击的三边界面,建立欧拉流出边界条件,以模拟冲击波在边界面上自由传播不发生反射和衰减,等效为半无限模型。

图 1 为颗粒尺寸分别为 10、15、20 μm,密实度为 63%的金属颗粒有限元模型。



(a) d=10 μm　　(b) d=15 μm　　(c) d =20 μm

图 1　密实度为 63%的金属颗粒细观有限元模型

Fig. 1　Meso-scale finite element model of copper with 63% TMD

2.3　材料模型

在材料类型的选择方面,以金属铜为代表开展相关细观仿真工作。采用 Steinberg Guinan 塑性本构模型以及 Grüneisen 状态方程模拟其受冲击压缩的过程。

Steinberg Guinan 塑性模型中,剪切模量 G 以及屈服应力 Y 受应变、应变率、压力、温度等因素影响

$$G=G_0\left\{1+\left(\frac{G_p'}{G_0}\right)\frac{p}{\eta^{1/3}}+\left(\frac{G_T'}{G_0}\right)(T-300)\right\} \tag{1}$$

$$Y=Y_0\left\{1+\left(\frac{Y_p'}{Y_0}\right)\frac{p}{\eta^{1/3}}+\left(\frac{G_T'}{G_0}\right)(T-300)(1+\beta\varepsilon)^n\right\} \tag{2}$$

式中:ε 为等效塑性应变,T 为温度,η 为比容,$\eta=V_0/V$,其他参数为介质参数。

当材料受压缩时,Grüneisen 状态方程可表示为

$$p=\frac{\rho_0 C^2\mu\left[1+\left(1-\frac{\gamma_0}{2}\right)\mu-\frac{\alpha}{2}\mu^2\right]}{\left[1-(S_1-1)\mu-S_2\frac{\mu^2}{\mu+1}-S_3\frac{\mu^3}{(\mu+1)^2}\right]^2}+(\gamma_0+a\mu)E \tag{3}$$

对于可膨胀材料

$$p=\rho_0 C^2\mu+(\gamma_0+a\mu)E \tag{4}$$

式中:C、S_1、S_2、S_3 为材料参数,其中常取 $S_2=S_3=0$;γ_0 为材料 Grüneisen 系数;a 为 γ_0 的一阶体积导数;$\mu=\rho/\rho_0-1$。铜金属颗粒材料参数见表 2。

表 2　铜物质材料参数

Table 2　Parameters of copper material

ρ/(g/cm^3)	γ_0	C_1/(m/s)	S_1	T/(K)
8.929 9	2.02	3 940	1.489	300
c_p/[J/(kg·K)]	G/(GPa)	Y/(GPa)	Y_{max}/(GPa)	β
383	47.7	0.12	0.64	36
n	G_p'	G_T'/(MPa/s)	Y_p'	T_{melt}/(K)
0.45	1.35	−17.98	3.396×10^{-3}	1 790

3 数值模拟结果

在数值模拟计算中，首先介绍基于细观仿真结果的材料冲击 Hugoniot 参数计算方法；其次为验证细观数值模拟方法的准确性，对已有实验结果的冲击压缩 Hugoniot 参数进行对比；最后给出不同密实度、颗粒直径的颗粒金属材料冲击 Hugoniot 曲线的影响规律细观模拟结果。

3.1 基于细观仿真结果的颗粒材料 Hugoniot 参数计算

在如图 2(a)所示单轴冲击压缩下，刚性墙以恒定速度 v 冲击压缩颗粒金属材料，并产生冲击波。在冲击压缩过程中，冲击波波阵面将材料分为已压缩和未压缩界面。波阵面后已压缩界面内材料的速度即粒子速度 u_p 与刚性墙的运动速度 v 相同，而波阵面在材料中传播的速度即冲击波速度 u_s 大于粒子速度 u_p。对于金属材料的状态方程，通常可用线性方程描述 u_s-u_p 的关系

$$u_s = c_0 + su_p \tag{5}$$

式中：c_0 表示零压时材料中的声速；s 为经验参数，定义了 u_s-u_p 曲线的斜率。u_s-u_p 的线性关系很好地描述了材料在未发生相变情况下的冲击响应。在数值模拟中，粒子速度 u_p 可由刚性墙的运动速度直接获得，而冲击波速度 u_s 则无法直接得到。为此，u_s 需要根据冲击波波阵面运动过程中不同时刻 t 的位置，利用下式进行计算得到

$$u_s = [x_s(t+\Delta t) - x_s(t)]/\Delta t \tag{6}$$

由于材料颗粒分布的随机性及孔隙的存在，使得冲击波在材料中并不是以平面波的形式传播，而是存在一个不平整的波阵面，如图 2(c)所示，因此，在选取波阵面位置时会带来一定难度和误差。在选取波阵面位置时采用如下方式进行处理：

对于非平面波阵面按照有限元网格划分，计算波阵面传播过的各列有限元网格数取其平均以获得等效平面波阵面，确定等效波阵面的瞬时位置 $x_s(t)$。

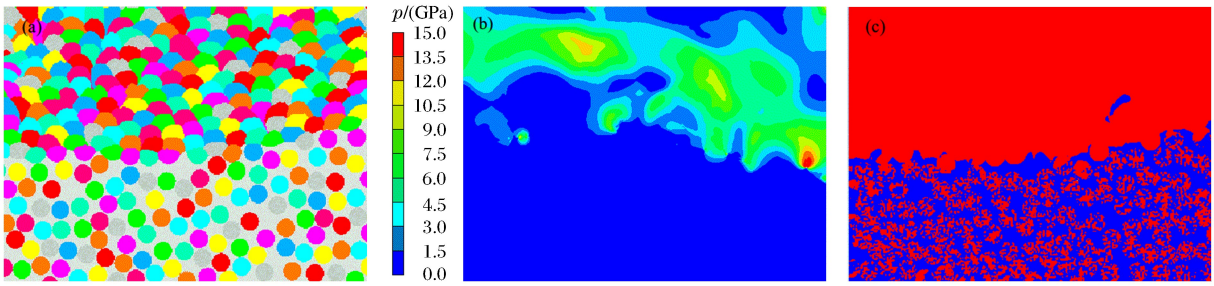


图 2 密实度为 63%、d=10μm、u_p=500 m/s 冲击压缩(a) 细观颗粒变形图；(b) 压力分布图；(c) 冲击波阵面位置

Fig. 2 Shock compression of 63% TMD d=10μm under u_p=500 m/s

((a) Deformation morphology of meso-scale model; (b) Pressure distribution morphology ; (c) Shock wave front morphology)

3.2 细观数值模拟与已有实验结果的对比

美国洛斯阿拉莫斯实验室在 20 世纪 50 年代开展了大量的材料高压(10～50 GPa)冲击压缩实验，并获得了相应的 Hugoniot 参数[21]。结合实验初始条件，利用细观仿真计算了不同密实度条件下材料的冲击响应，并利用上述方法得到了 Hugoniot 参数。对比细观仿真与实验 Hugoniot 参数，如图 3 所示，在低速冲击段(u_p＜1 500 m/s)，材料细观模拟计算结果与实验结果误差较大；而在中速和高速冲击段(u_p＞1 500 m/s)，数值模拟计算结果与已有实验结果吻合较好；随着材料密实度的增加，数值模拟计算结果与实验误差逐渐减小。从整体上来看，利用该细观模拟方法得到的 u_s-u_p 曲线与实验数据吻

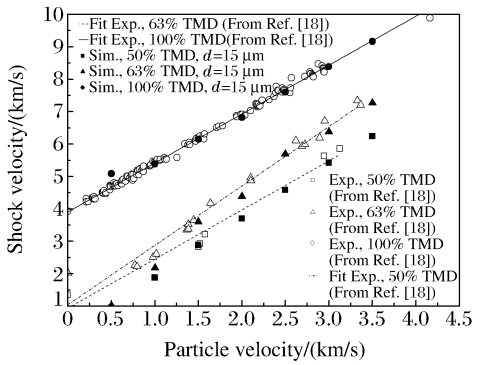


图 3 不同密实度条件下 Cu 细观模拟计算与实验[20] Hugoniot 参数对比图

Fig. 3 Comparison of the simulated and experimental[20] Hugoniot parameters for copper with different TMD

合较好。综上所述,建立的细观有限元模拟方法可行,能较好地计算材料冲击 Hugoniot 参数,选取的材料参数正确。

表 3　细观数值模拟计算与实验 Hugoniot 参数对比

Table 3　Comparison of the Hugoniot parameters from meso-scale simulation with experiment

TMD	$d/(\mu m)$	$C_{cal}/(km/s)$	S_{cal}	$C_{exp}/(km/s)$	S_{exp}
50%	15	0.221 6	1.730 7	0.940 9	1.514 4
63%	15	0.186 8	2.087 6	1.050 3	1.830 1
100%	15	4.128 1	1.406 8	3.909 5	1.508 6

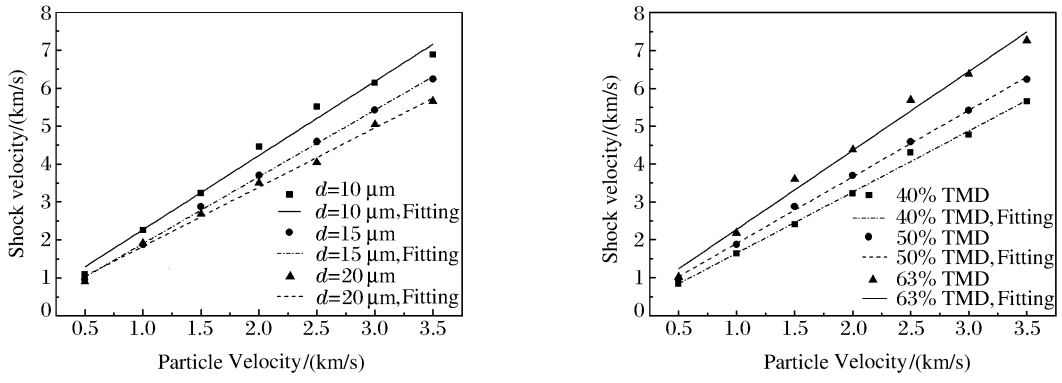
为了得到材料细观参数如颗粒粒径、密实度等对材料冲击响应的影响,对同一密实度不同粒径以及同一粒径不同密实度情况下的材料细观特性的冲击压缩行为进行了数值仿真计算,得到了相应 Hugoniot 参数,如表 4 所示。

表 4　不同密实度与粒径情况下细观模拟 Hugoniot 参数计算结果

Table 4　Hugoniot parameters calculated from meso-scale simulation with different TMD and particle sizes

TMD	$d/(\mu m)$	$C/(km/s)$	S	TMD	$d/(\mu m)$	$C/(km/s)$	S
50%	10	0.316 7	1.954 4	40%	15	0.030 7	1.615 8
50%	15	0.146 7	1.758 8	63%	15	0.186 8	2.087 5
50%	20	0.271 8	1.561 1				

对比材料在相同密实度不同粒径情况下的 Hugoniot 参数,如图 4(a)所示,材料 u_s-u_p 曲线的斜率随着颗粒粒径地增加而减小,表明相同冲击条件下随着颗粒粒径地增加,冲击波速度 u_s 不断降低;而在相同粒径不同密实度的情况下,如图 4(b)所示,材料 u_s-u_p 曲线的斜率随密实度地增加而增大,表明在相同颗粒粒径情况下随着密实度地提高,冲击波速度 u_s 逐步增加。



(a) The size of particles (50% TMD)　　(b) TMD (d=15 μm)

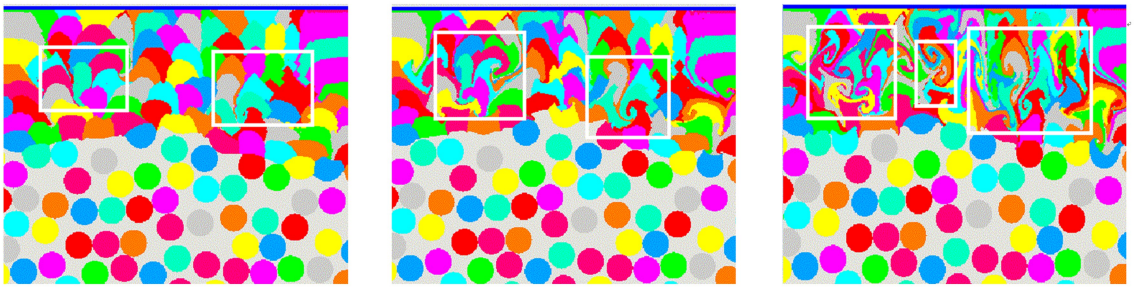
图 4　材料颗粒的粒径和密实度对材料 Hugoniot 参数的影响

Fig. 4　Hugoniot parameters depending on the size of particles and TMD

3.3　冲击压缩细观变形行为仿真结果

材料冲击压缩过程中随着冲击波的传播,在细观尺度上引起材料颗粒产生冲击变形,并与相邻颗粒互相碰撞、混合、熔融。这种变形程度随着冲击速度的增加而愈加剧烈。图 5 为 63% TMD、粒径为 15 μm的细观模型在冲击速度 500、1 000、2 500 m/s 情况下的变形情况。当冲击速度为 500 m/s 时,如

图 5(a)所示，颗粒间产生碰撞作用，部分颗粒发生局部变形；当冲击速度增加为 1 000 m/s，如图 5(b)所示，颗粒间的相互作用更加明显，颗粒之间产生微射流现象，与 Willamson[22] 得到的现象一致，颗粒变形情况明显；当冲击速度继续增加时，如图 5(c)所示，颗粒之间产生更为强烈的作用并进一步混合，颗粒变形情况剧烈。



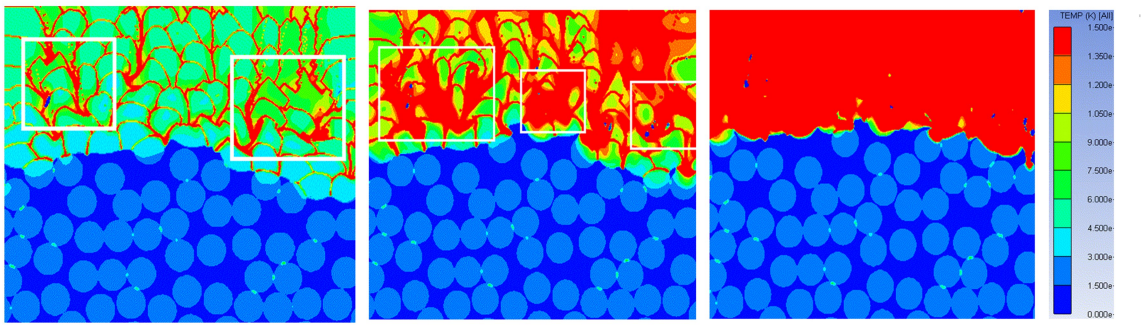
(a) u_p =500 m/s (b) u_p=1 000 m/s (c) u_p=2 500 m/s

图 5 Cu 颗粒细观模型冲击压缩变形形态(密实度为 63%、d=15 μm)

Fig. 5 The morphologies of copper meso model(63% TMD, d=15 μm) under different impact velocities

3.4 冲击压缩细观模拟温升结果

伴随冲击波在材料中传播产生的颗粒变形，引起了材料塑性功的变化，部分塑性功转化为热能，从而带来了冲击温升现象。冲击速度直接决定着冲击温升的程度。图 6 为不同冲击速度下材料细观模型冲击温升情况。当冲击速度为 500 m/s 时，如图 6(a)所示，颗粒内部温度较低，在与其他颗粒直接接触的颗粒边界区域温度较高，超过了材料熔点(Cu 的熔点为 1 360 K)，部分颗粒区域边界产生熔融现象；当冲击速度增加为 1 000 m/s，如图 6(b)所示，温升程度加剧，颗粒间相互作用区域加大，颗粒边缘及部分颗粒内部区域超过材料熔点，从而在更多区域产生熔融现象；当冲击速度进一步增加达到 2 500 m/s，如图 6(c)所示，温升情况进一步加剧，颗粒边缘及内部区域均达到材料熔点，因此冲击波传过的整个区域均产生熔融现象。



(a) u_p =500 m/s (b) u_p=1 000 m/s (c) u_p=2 500 m/s

图 6 密实度为 63%、d=15 μm 细观模型在不同冲击速度下温升情况

Fig. 6 The temperature rise of copper meso-scale model(63% TMD, d=15 μm) under different impact velocities

4 数值模拟结果分析

(1) 对比细观数值模拟与实验得到的 Hugoniot 参数，在密实度较低、尤其是冲击速度也较低的情况下，细观计算与实验数据点存在一定程度的误差；但随着冲击速度的提高，误差逐渐减小；在高密实度情况下，整个冲击速度段数据点都吻合良好。因此，采用细观数值模拟方法能够得到与实验方法接近的 Hugoniot 参数，能够较为准确地预测 u_s-u_p 曲线。

(2) 颗粒金属材料在冲击压缩作用下,产生了细观颗粒间的碰撞、混合、熔融,产生冲击变形及温升。这种冲击变形与温升随着冲击波速度的增加而愈发强烈。如图 7 所示,当颗粒存在局部位置温升超过材料熔点时,颗粒就无法保持其原有形态,在其达到熔融状态的局部位置发生强烈变形,并与相邻同样达到该状态的颗粒局部产生混合,类似流体流动的状态,从而产生大变形。因此,材料细观颗粒形态随着冲击波速度、强度的加大,颗粒温升提高,达到熔点状态的位置增加,从而造成变形程度的加剧。

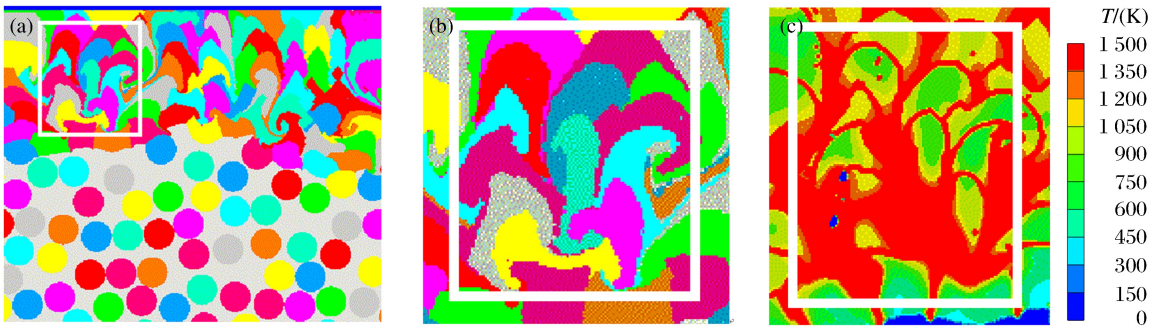


图 7　密实度为 63%、d=15 μm 细观模型在 u_p=1 000 m/s 时,(a) 变形图;(b) 局部变形图;(c) 局部温升图

Fig. 7　The morphologies of 63% TMD d=15 μm meso-scale model under u_p=1 000 m/s

(a) Deformation morphology; (b) Local deformation morphology; (c) Local temperature morphology

(3) 利用细观有限元方法计算材料 Hugoniot 参数,在低速冲击段,由于冲击强度低且加上细观模型中颗粒分布的随机性及孔隙的存在,造成压力分布极不均匀,波阵面平面度差,难以准确捕捉波阵面位置,采用的等效策略也与实际情况存在偏差,从而造成与实验数据的较大误差;而随着冲击速度的增加,高强度冲击压缩对材料细观模型波阵面起到了一个整形的作用,提高了波阵面的平面度,从而能够得到与实验数据吻合较好的计算结果。

(4) 在材料细观模型具有相同密实度、不同颗粒粒径的情况下,随着颗粒粒径的增大,造成局部颗粒间空隙面积增大,在冲击波传播过程中,该空隙的存在会影响颗粒间的相互作用及冲击压力的传递进而影响细观模型中冲击波的传播;而在不同密实度、相同颗粒粒径的情况下,随着密实度的增加,模型中颗粒的数量增加,局部颗粒间空隙面积减少,伴随冲击波传播的颗粒间相互作用的程度增强,从而有利于冲击波的传播。

5　结　论

针对颗粒金属材料细观分布特性,经合理简化得到了细观有限元模型,并利用有限元软件 AUTODYN 模拟了材料在冲击压缩下细观变形形态的演化情况、冲击温升以及力学响应,建立了从材料细观冲击压缩有限元数值模拟结果获得材料 Hugoniot 参数的方法。对颗粒金属材料细观分布规律经过合理简化后所建立的细观有限元模型及其计算结果可有效反映已有的实验结果,验证了利用该方法模拟材料冲击压缩过程的正确性。从不同颗粒粒径与密实度颗粒金属材料的冲击压缩细观仿真模拟结果可以看出:(1) 随着冲击速度的增加,颗粒细观变形程度越大,细观颗粒混合越强烈,冲击温度提高;(2) 在相同密实度条件下,随着细观颗粒粒径 d 的增加,u_s-u_p 曲线斜率下降,冲击波在材料中传播的速度降低;(3) 在相同颗粒粒径条件下,随着密实度的增加,u_s-u_p 曲线斜率升高,冲击波在材料中传播的速度增加。

References:

[1]　Zhang X F, Zhao X N. Review on multifunctional energetic structural materials [J]. Chinese Journal of Energetic Materials, 2009, 17(6): 731-739. (in Chinese)

张先锋,赵晓宁. 多功能含能结构材料研究进展 [J]. 含能材料,2009,17(6):731-739.

[2] Thadhani N N, Graham R A, Royal T, et al. Shock-induced chemical reactions in titanium-silicon powder mixtures of different morphologies: Time-resolved pressure measurements and materials analysis [J]. J Appl Phys, 1997, 82(3): 1113-1128.

[3] Boslough M B. A thermochemical model for shock-induced reactions (heat detonations) in solids [J]. J Chem Phys, 1990, 92(3): 1839-1848.

[4] Eakins D E, Thadhani N N. Shock compression of reactive powder mixtures [J]. Int Mater Rev, 2009, 54(4): 181-213.

[5] Benson D J. An analysis by direct numerical simulation of the effects of particle morphology on the shock compaction of copper powder [J]. Model Simulat Mater Sci Eng, 1994, 2(3): 535-550.

[6] Benson D J, Conley P. Eulerian finite-element simulations of experimentally acquired HMX microstructures [J]. Model Simulat Mater Sci Eng, 1999, 7(3): 333-354.

[7] Benson D J. The calculation of the shock velocity-particle velocity relationship for a copper powder by direct numerical simulation [J]. Wave Motion, 1995, 21(1): 85-99.

[8] Benson D J, Nellis W J. Dynamic compaction of copper powder: Computation and experiment [J]. Appl Phys Lett, 1994, 65(4): 418-420.

[9] Austin R A, McDowell D L, Benson D J. Numerical simulation of shock wave propagation in spatially-resolved particle systems [J]. Model Simulat Mater Sci Eng, 2006, 14(4): 537-561.

[10] Austin R A. Numerical simulation of the shock compression of microscale reactive particle systems [D]. Atlanta: Georgia Institute of Technology, 2005.

[11] Austin R A. Modeling shock wave propagation in discrete Ni/Al powder mixture [D]. Atlanta: Georgia Institute of Technology, 2010.

[12] Eakins D E, Thadhani N N. Mesoscale simulation of the configuration-dependent shock-compression response of Ni + Al powder mixtures [J]. Acta Mater, 2008, 56(7): 1496-1510.

[13] Eakins D E, Thadhani N N. Discrete particle simulation of shock wave propagation in a binary Ni+Al powder mixture [J]. J Appl Phys, 2007, 101(4): 043508.

[14] Eakins D E. Role of heterogeneity in the chemical and mechanical shock-response of nickel and aluminum powder mixtures [D]. Atlanta: Georgia Institute of Technology, 2007.

[15] Fredenburg D A, Vogler T J, Thadhani N N. Meso-scale simulation of the shock compression response of equiaxed and needle morphology 6061 aluminum powders [C]//Elert M L, Furnish M D, Anderson W W, et al. Shock Compression of Condensed Matter-2009. New York: AIP, 2010: 1341-1344.

[16] Zhou D, Huang F L, Yao H S. Meso-damage experimental studies on the PBX [J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants, 2007, 30(3): 16-18. (in Chinese)
周 栋,黄风雷,姚惠生. PBX 炸药细观损伤的实验研究 [J]. 火炸药学报,2007,30(3):16-18.

[17] Zhou D, Huang F L, Yao H S. Study on the visco-elastic constitutive model of PBX [J]. Transactions of Beijing Institute of Technology, 2007, 27(11): 945-947. (in Chinese)
周 栋,黄风雷,姚惠生. PBX 炸药粘弹性损伤本构关系研究 [J]. 北京理工大学学报,2007,27(11):945-947.

[18] Chen P W, Ding Y S, Chen L. Progress in the study of damage and mechanical properties of energetic materials [J]. Advances in Mechanics, 2002, 32(2): 212-222. (in Chinese)
陈鹏万,丁雁生,陈 力. 含能材料装药的损伤及力学性能研究进展 [J]. 力学进展,2002,32(2):212-222.

[19] Dai K D, Chen P W. Numerical simulation of the shock compaction of W/Cu powders [J]. Mater Sci Forum, 2011, 673: 113-118.

[20] Granqvist C G, Buhrman R A. Ultrafine metal particles [J]. J Appl Phys, 1976, 47(5): 2200-2219.

[21] Marsh S P. LASL Shock Hugoniot Data [Z]. Berkeley, CA: University of California Press, 1980.

[22] Williamson R L. Parametric studies of dynamic powder consolidation using a particle-level numerical model [J]. J Appl Phys, 1990, 68(3): 1287-1296.

[23] Zhang X F, Zhao X N, Qiao L. Theory analysis on shock-induced chemical reaction of reactive metal [J]. Explosive

and Shock Waves,2010,30(2):145-151. (in Chinese)
张先锋,赵晓宁,乔　良. 反应金属冲击反应过程的理论分析 [J]. 爆炸与冲击,2010,30(2):145-151.
[24] Zhang X F,Qiao L,Shi A S,et al. A cold energy mixture theory for the equation of state in solid and porous metal mixtures [J]. J Appl Phys,2011,110(1):013506.

Meso-Scale Numerical Simulation of the Shock Compression of Particle Metal Materials

QIAO Liang[1,2], ZHANG Xian-Feng[1], HE Yong[1],
SHI An-Shun[1,3], ZHANG Jiang[1,4]

(1. *Ministerial Key Laboratory of ZNDY, Nanjing University of Science & Technology, Nanjing* 210094, *China*;
2. *Beijing Institute of Space Long March Vehicle, Beijing* 100076, *China*;
3. *Yantai Branch of China Academy of Ordnance Science, Yantai* 264003, *China*;
4. *Ningbo Branch of China Academy of Ordnance Science, Ningbo* 315103, *China*)

Abstract: Meso-scale characteristics of particle metal materials (PMM) play an important role in determining its macro-scale mechanical property. In order to investigate relationship between meso-scale characters (particle size, distribution, morphology, porosity) and macro-scale mechanical property, a FEM meso-scale model which can follow the distribution of real structure was built with reasonable simplification. By exploiting AUTODYN FEM software, shock compression process of PMM was simulated and Hugoniot parameters of typical PMM were extracted. Based on the simulated results, conclusion was made on how the meso-scale characteristics (e. g. theoretical mass density, particle size) make impact on the macro-scale shock compression mechanical property. Deformation morphologies and temperature rise during shock compression were also acquired by simulations. It is shown that the simulated result shows a good agreement with the experiment and the meso-scale characteristics of PMM play an important role on its macro-scale property.

Key words: particle metal materials; shock compression; meso-scale model; Hugoniot parameters; numerical simulation