

高压物理学报

GAOYA WULI XUEBAO

1987年9月创刊

2020年虚拟主题专刊

· 高压下材料动态响应的计算与模拟 ·

目次

位错动力学在极端环境力学中的发展及应用	崔一南, 柳占立, 胡剑桥, 刘凤仙, 庄 茁
高温、高压、高应变速率动态过程晶体塑性有限元理论模型及其应用	刘静楠, 叶常青, 刘桂森, 沈 耀
基于八面体理论的岩石循环加-卸载本构模型及修正	罗吉安, 刘丰茂, 刘之喜, 马雷鸣, 陈烨开, 李欣慰
金属材料试件在压缩、扭转、拉伸断裂过程中的应力状态变化及表征	伍星星, 刘建湖, 孟利平, 王海坤, 汪 俊
高围压下砂岩循环加-卸载损伤本构及损伤阈值	刘之喜
冲击荷载对无烟煤微观孔隙影响的分形研究	王以贤, 梁为民
《高压物理学报》2020年虚拟主题专刊名录	《高压物理学报》编辑部



官方网站: www.gywlxb.cn

官方邮箱: gaoya@caep.cn

联系电话: 0816-2490042



《高压物理学报》2020 年虚拟主题专刊名录

- ✧ 高压物性实验研究
- ✧ 高压物性的计算与模拟
- ✧ 高压地球科学
- ✧ 高压实验技术
- ✧ 高压下材料动态响应实验研究
- ✧ 高压下材料动态响应的计算与模拟
- ✧ 复合材料与结构的动态响应计算与模拟
- ✧ 高压科学应用——水下爆炸
- ✧ 高压科学应用——侵彻与防护
- ✧ 高压科学应用——气相爆炸

★ 获取地址: <http://www.gywlxb.cn/topics>

位错动力学在极端环境力学中的发展及应用

崔一南¹, 柳占立¹, 胡剑桥², 刘凤仙¹, 庄 茁¹

(1. 清华大学航天航空学院应用力学实验室, 北京 100086;
2. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)

摘要: 作为联系分子动力学和连续介质力学方法的桥梁, 离散位错动力学 (DDD) 方法近些年来取得了诸多进展。其典型代表就是 DDD 与连续介质有限元方法 (FEM) 的耦合, 使其可以考虑复杂的边界条件及多物理场的耦合作用。首先介绍了 DDD 方法及其与 FEM 耦合的典型方法, 然后面向高应变率、高温、强辐照几种极端环境, 系统阐述了 DDD 及其耦合方法的发展思路 and 进展, 展示了该方法在揭示微观机理、发展连续化理论模型上的若干成果。

关键词: 离散位错动力学; 高应变率; 高温; 高压; 强辐照

中图分类号: O344.1

文献标识码: A

随着现代科技的发展, 越来越多的材料和结构需要在极端环境中服役。金属材料在高应变率、高温、高压等极端条件下的力学行为与常态下有着显著的区别, 变形失效机理非常复杂, 给材料在极端条件下服役时的性能评价和安全评估带来了挑战。在极端环境下, 相关实验研究往往需要巨大的经费投入, 并且仍然显著受限于时空分辨率, 难以解耦复杂影响因素。近些年来, 多尺度数值计算方法的迅猛发展为理解极端环境下材料与结构的变形失效机理提供了前所未有的机遇。

如图 1 所示, 材料变形和破坏的内在多尺度物理过程可以借助不同时空尺度的计算方法加以研究。通常来说, 计算的尺度越小, 捕捉的物理过程越完备, 但是也意味着更显著的复杂性, 其所能研究的时空尺度也就越小。目前广泛采用的纳观尺度计算方法主要是分子动力学 (Molecular dynamics, MD) 模拟方法。该方法将原子看作质点, 通过求解牛顿运动方程, 获得系统内所有原子的运动轨迹, 基于对大量离散原子运动性质的统计平均得到宏观意义上的物理量。这一方法能够从最基本的原子尺度刻画晶格迁移、缺陷演化等信息, 通过大规模原子模拟, 探寻材料变形的原子级机理^[1-3]。该方法对于揭示缺陷形核及基本相互作用机制等提供了很多有价值的信息。例如, Zhu 等^[4]通过分子动力学模拟系统地研究了纳米单晶材料在不同应变率加载下的变形过程, 研究结果表明位错的表面形核机制对纳米材料的屈服起着主导作用, 继而从原子热激活角度出发提出了在给定温度和应力状态下的位错形核率; Liu 等^[5]揭示了单个位错线与离散的辐照缺陷之间的相互作用机理。但是, 由于受计算能力的限制, 该方法能够处理的问题在时间和空间尺度上仍然具有很大局限性。经典的 MD 模拟目前能够处理的问题尚在皮秒 (10^{-12} s) 量级。此外, 为了缩短计算时间, 通常需要增加载荷速率, 模拟过程中的应变率远高于实验值, 而高应变下的微结构演化特征可能失真。

为了拓展研究问题的时空尺度, 大量采用连续介质力学有限元计算研究材料的力学响应, 针对离散的微观结构进行统计平均, 得到宏观意义上的物理量, 通过在连续介质框架中引入与微结构演化相关的内禀参数来描述微结构演化。对材料微塑性行为研究通常基于两种理论框架。一种是基于 J2 塑性理论, 研究者通过在屈服应力中引入考虑几何必需位错的 Taylor 硬化模型, 建立了应变梯度塑性理

* 收稿日期: 2020-02-26; 修回日期: 2020-03-31

基金项目: 科学挑战专题 (TZ2018001); 国家自然科学基金 (11972208, 11921002)

作者简介: 崔一南 (1987—), 女, 副教授, 主要从事极端环境力学研究. Email: cyn@mail.tsinghua.edu.cn

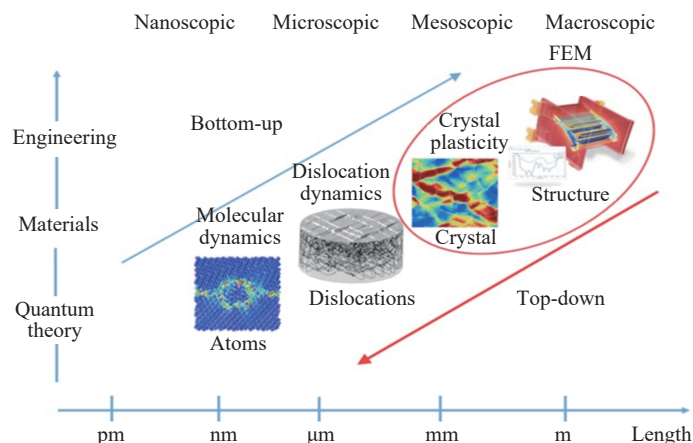


图 1 材料变形失效行为研究在不同时空尺度下通常采用的计算方法^[6]

Fig. 1 Simulation methods at different temporal and spatial scales to investigate material deformation and failure mechanisms^[6]

论^[7-8]。该方法采用各向同性硬化,不包含晶体中滑移系的信息,因而无法反映晶体取向的影响。另一种是晶体塑性理论,研究者以位错密度为演化量建立每个滑移系的位错密度演化方程或者直接建立各个滑移系上塑性量的演化方程来描述材料的塑性变形行为^[9-12]。该方法较好地预测了单轴压缩、纳米压痕、变形形态学、动态冲击等问题,能模拟的时间和空间尺度相比 MD 方法有较大的提升,然而模拟过程通常是引入以位错密度为代表的内变量,对位错微结构等细节的刻画具有一定的局限性。

此外,MD 模拟难以为晶体塑性理论所考虑的大量微结构累积行为描述提供直接信息。为解决这一问题,必须借助微观尺度的离散位错动力学 (Discrete dislocation dynamics, DDD) 方法向下联系 MD,向上联系晶体塑性理论。DDD 方法以位错线为研究对象,可以从离散层次处理比原子尺度更大的塑性问题,其特征时间和空间尺度在亚微米、微米和秒量级,与原位投射电镜(TEM)实验中位错运动的时空尺度相一致。因此,离散位错动力学被认为是一种“计算实验”^[13],是揭示微尺度塑性形变失效机制非常有效的手段^[14-16]。

本文中首先简要介绍位错动力学方法,然后分别介绍近些年该方法在高应变率、高温及辐照极端环境下的发展和应用。

1 位错动力学方法简介

DDD 方法主要是基于位错的弹性理论发展起来的,通过求解弹性体中位错线的运动方程来计算塑性应变。如图 2^[17]所示,其基本思路为首先将位错线离散为具有一定长度的位错段,然后计算位错段所受到的力,继而计算在一定的温度等条件下的位错运动速度,据此更新位错的位置。当位错之间的距离很近时,根据能量法则判断其是否发生相互反应。此外,对于螺性位错还需要判断其是否发生交滑移机制,继而更新外载条件,并且计算位错产生的塑性应变。此过程不断循环,直到加载完成。

早在 1968 年,Foreman^[18]就基于二维位错动力学研究了位错和刚性障碍物的相互作用。20 世纪 80 年代以来,随着计算条件的不断改善,大量的二维离散位错动力学模拟 (2D-DDD) 相继涌现。它们通常只考虑无限长的直刃位错组,从垂直位错线的平面上看,每根位错线都对应一个带有滑移系特征的离散的点。Deshpande 等^[19-20]发展了有限变形框架下的 2D-DDD,模拟了微柱拉伸试验,结果表明当限制拉伸轴的旋转时,会引起几何必需位错密度的累积,弱化尺寸效应而强化包辛格效应。我国华中科技大学李振环课题组利用 2D-DDD 模拟,系统地研究了微柱压缩^[21]和纳米压痕^[22]中的尺寸效应。此外,他们在 2D-DDD 中引入了位错攀移和晶界穿透机制,研究了多晶镍基合金的疲劳裂尖特征等^[23]。但是,通常 2D-DDD 无法考虑三维位错连接的形成和破坏,所捕捉到的应变硬化行为多是由 GND 的存

储引起的^[24]。为解决这一问题, Benzerga^[25]发展了 2.5D-DDD, 引入了一些表征三维位错反应的法则, 捕捉到了微柱压缩过程中的位错匮乏硬化现象。但是, 此类模型涉及到诸多简化, 难以考虑复杂的位错反应, 也难以重现真实的位错构型。

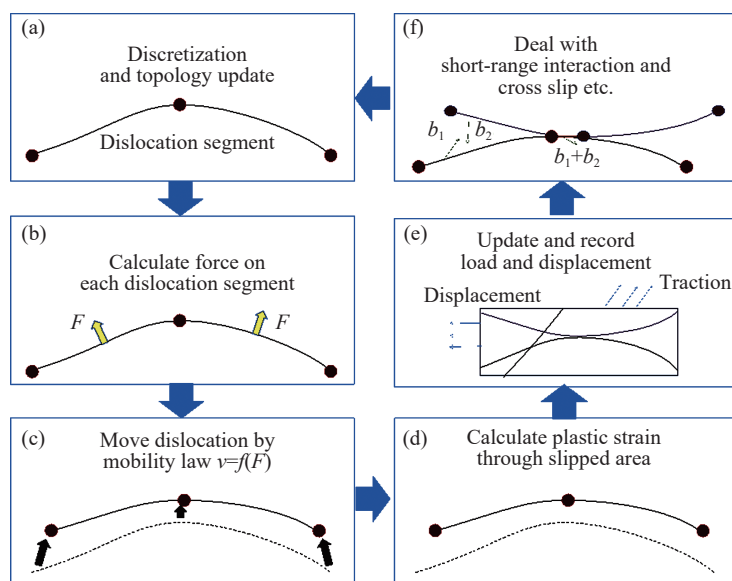


图 2 位错动力学基本流程图^[17]

Fig. 2 Flowchart of dislocation dynamics method^[17]

三维离散位错动力学 (3D-DDD) 则可以更全面的考虑不同类型的位错反应, 并且自然捕捉真实的三维位错形貌。如图 3 所示, 在现有的 3D-DDD 中, 位错线有两种离散方式。一种是依赖于潜在晶格的描述, 将位错线离散为刃型-螺型位错段或刃型-混合型-螺型位错段。力的计算在位错段的中点上, 进行, 即图 3(a) 中的空心点。它起源于 Kubin 等^[26] 的模型, 便于保证位错段的运动始终沿着晶体取向进行, 计算效率高。另一种是连续化描述, 将位错段离散为通过节点连接的直线位错段^[27] 或曲线位错段^[28], 位错段的节点位置和取向可以连续变化, 力的计算在位错段的节点上进行, 即图 3(b) 中的实心点。该方法易于处理复杂形状的位错线^[29]。

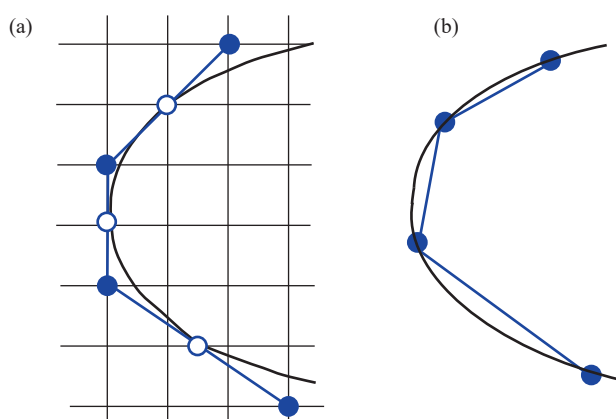


图 3 三维位错线的不同离散方式: (a)基于晶格的描述, (b)连续化描述

Fig. 3 Different discretization of three-dimensional dislocation lines:
(a) lattice based description, (b) continuum description

单纯的 3D-DDD 模拟往往存在一定的局限性: (1) 通常采用周期性边界条件, 位错之间的相互作用基于位错在无限大体积中的弹性应力场得到, 难以有效计算复杂形状表面或界面的镜像力; (2) 3D-

DDD 模型多采用固壁假设,适用于模拟小变形情况,无法考虑变形过程中试样形貌的变化;(3)位错核附近的强烈非线性效应难以精确描述;(4)计算成本随着位错段数量的增加而急剧增加,模拟所能达到的尺寸范围和应变范围仍然比较有限。为了解决上述问题,前人开展了大量工作将 DDD 与其他尺度的计算方法(如分子动力学、连续介质力学)结合,实现多尺度模拟。到目前为止,DDD 与有限元方法^[12,29-30]或边界元方法^[28,31]的耦合主要有两种思路:一种是叠加法(Superposition method, SPM),另一种是离散连续晶体塑性计算方法(Discrete-continuous model, DCM)。

叠加法最初是由 Giessen 等^[30]提出的。如图 4 所示,有限晶体试样中的总应力场 σ 包括两个部分

$$\sigma = \sigma^\infty + \hat{\sigma} \quad (1)$$

式中: σ^∞ 为位错在无限介质中产生的应力场,通常可借助解析解得到; $\hat{\sigma}$ 为附加应力场,用于抵消该面力的作用并修正真实的位移边界条件。 σ^∞ 会在真实试样的表面产生面力

$$T = \sigma^\infty \cdot n_s \quad (2)$$

式中: n_s 为表面的法向。

叠加法可以很好地捕捉位错间的短程相互作用^[32],但是每一根位错的解析应力场都需要在每个计算步重新计算,占用较长的计算时间。同时,该方法基于两个弹性场的叠加,难以直接体现塑性应变的概念。

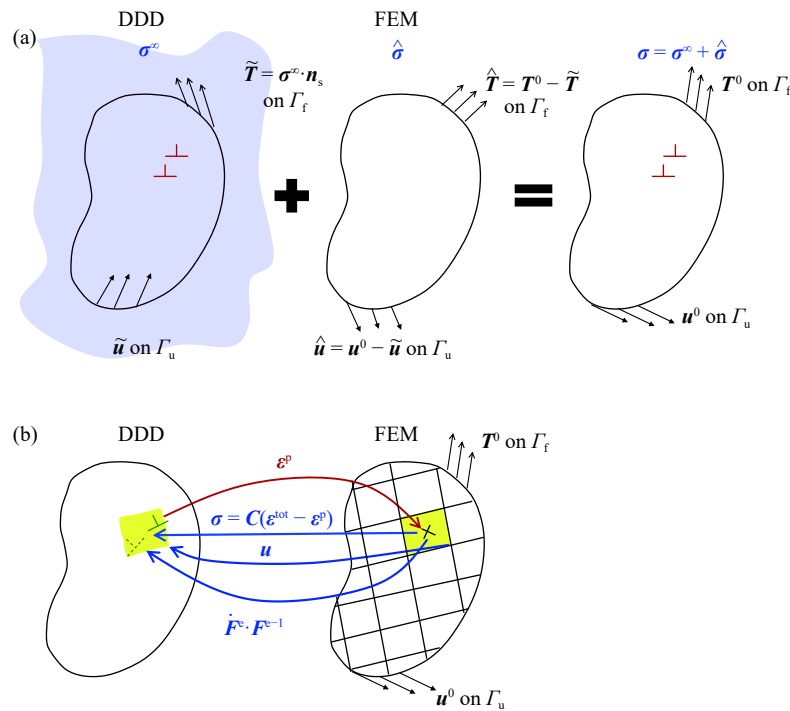


图 4 叠加法示意图(a)和 DCM 方法变量传递示意图(b)^[33]

Fig. 4 Schematic of superposition method (a) and the variable transfer process in discrete continuous method (b)^[33]

DCM 基于细观力学中的特征应变思想,直接根据 DDD 计算的塑性应变,在统一的有限元框架下求解边值问题的解^[33-35]。如图 4(b) 所示,主要包括 4 个变量传递过程^[33]。(1)利用 DDD 计算位错的滑移量,进而计算塑性应变 ϵ^p ,并将其传递给有限元模型(FEM),以此来代替传统唯象的本构关系

$$\dot{\sigma}^e = C^e : (\dot{\epsilon} - \dot{\epsilon}^p) \quad (3)$$

式中: $\dot{\sigma}^e$ 是 Cauchy 应力 σ 的客观应力率, C^e 是弹性模量张量, $\dot{\epsilon}$ 和 $\dot{\epsilon}^p$ 分别是总应变率和塑性应变率张量。(2)根据边界条件,在统一的连续介质框架下,利用 FEM 求解该塑性应变所对应的平衡应力场^[12,36]

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{f}^{\text{int}} = \mathbf{f}^{\text{ext}} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \mathbf{M} = \int_{\Omega} \rho \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega \\ \mathbf{f}^{\text{int}} = \int_{\Omega} \mathbf{B}_e^T \boldsymbol{\sigma} d\Omega \\ \mathbf{f}^{\text{ext}} = \int_{\Gamma} \mathbf{B}_e^T \mathbf{T}^0 d\Gamma + \int_{\Omega} \mathbf{B}_e^T \boldsymbol{\sigma}^0 d\Omega \end{cases} \quad (5)$$

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \mathbf{u}^0 & \Gamma \in \Gamma_u \\ \mathbf{T} = \mathbf{T}^0 & \Gamma \in \Gamma_f \\ \mathbf{T} = 0 & \Gamma \notin (\Gamma_u \cup \Gamma_f) \end{cases} \quad (6)$$

式中: $\mathbf{M}$ 是质量矩阵, $\mathbf{u}$ 为位移场, $\mathbf{N}$ 是形函数向量, ρ 是材料密度, Ω 代表体积, $\mathbf{B}_e = \text{grad}[\mathbf{N}]$, $\mathbf{f}^{\text{int}}$ 是内部节点力向量, $\mathbf{f}^{\text{ext}}$ 是外加面力 $\mathbf{T}^0$ 和初始应力场 $\boldsymbol{\sigma}^0$ 引起的外部节点力。这里, $\boldsymbol{\sigma}^0$ 是由试样中初始存在的静态位错引起的。随后, 将 FEM 计算的应力场 $\boldsymbol{\sigma}$ 传递给 DDD, 并作为外力驱动位错运动。由于 FEM 无法准确计算位错核附近的应力场, 位错间的近程相互作用力需要通过解析解加以修正。(3)FEM 计算得到的位移场 $\mathbf{u}$ 传递给 DDD, 以保证位错动力学模型和有限元模型同步变形。(4)FEM 计算得到的变形梯度场传递给 DDD, 以考虑滑移系的转动效应。

如何将 DDD 中计算得到的离散塑性应变场 $\boldsymbol{\varepsilon}^p$ 合理分配至连续介质力学框架中的材料点上, 是 DCM 的核心问题。研究者们对此开展了大量研究, 并提出了多种不同的塑性局部化分配方案^[12, 32, 35], 其主要差别在于塑性局部化时所选的特征体积以及向有限元积分点分配塑性应变量的权函数不同。Cui 等^[33]通过定量对比各种局部化分配方案的优缺点, 整合各方法的优势, 提出了一种新的塑性局部化方案, 该方法考虑了局部化参数对滑移系信息的依赖性, 表现出良好的计算精度。同时, 还提出了有效的应力插值方案, 弥补了 DCM 相对于 SPM 方法在计算镜像力方面精度不足的缺陷。

2 位错动力学在高应变率效应研究中的进展与应用

与常态下相比, 高速冲击导致的极端高温、高压、高应变率条件使得金属材料的物理和力学性质均会发生显著的改变, 这给获得材料在冲击波加载下的状态方程、冲击强度等动力学参数带来了挑战。在冲击波加载下, 材料的变形从受力处向材料的内部快速传播, 冲击波的波形则能够反映材料的动态响应特征, 包括材料物态和强度等的变化。目前材料动态本构模型的建立及参数确定主要依赖于宏观屈服强度的拟合, 相关模型的适用性受到极大的限制。因此, 大量研究者试图深入研究极端条件下材料的塑性变形机理, 构建基于微介观机理的动态本构模型。

随着计算机数值模拟技术的发展, 各种数值模拟方法已经成为获取材料在冲击载荷等极端条件下内部微结构演化的重要手段。目前以 MD 模拟和 DDD 为核心的多尺度计算方法在研究金属材料冲击问题中得到了广泛的应用。本节将主要介绍 DDD 方法在高应变率条件下的发展及应用。

DDD 方法在研究高应变率乃至冲击加载下材料的动力学行为时面临新的挑战, 主要包括: (1) 高应变率下位错的运动规律发生变化; (2) 高应变率下位错的形核萌生过程起着重要作用; (3) 高应变率往往伴随着高温和高压效应, 其中冲击波压缩会引起高温。此外, 位错运动导致大量的塑性热产生, 使得材料温升进而引起热力耦合过程; (4) 超高应变率下, 位错动力学的准静态应力场解不再适用, 亟需发展高速位错的弹性动力学理论, 揭示其相互作用规律由于时间依赖性及历史依赖性带来的新机理。对上述问题的研究与认识常常需要借助大量 MD 的研究、冲击实验以及深入的理论分析, 下面将分别展开进行具体介绍。

2.1 高应变率下的位错运动规律

传统的 DDD 模拟常常研究材料在准静态加载下的变形过程, 位错的运动通常被认为处于过阻尼状态, 即忽略位错的惯性效应^[37]。Hirth 等^[38]从热力学角度出发推导了位错在不同速度下的有效质量;

Gurrutxaga-Lerma 等^[39]进一步总结了各种高速位错的运动方程,并详细探讨了不同运动方程对材料动力学响应的影响。Wang 等^[40]通过 DDD 模拟对比了考虑包含位错惯性效应和不包含位错惯性效应的运动方程对材料力学行为的影响。研究表明,当加载应变率超过 10^3 s^{-1} 时,位错惯性效应对材料力学行为的影响开始凸显,从而不可被忽略;同时 Wang 等也详细探讨了质量项的相对论效应(即当位错速度接近剪切波速时的质量修正),发现即便当应变率高达 10^6 s^{-1} 时,大多数位错的运动速度仍小于 50% 的声速,因此可以在一定程度上忽略速度变化对位错等效质量造成的影响。因此,在考虑高应变率效应时,常采用包含位错惯性效应的运动方程

$$m_e \dot{v} + B_z v = f \quad (7)$$

式中: m_e 为单位长度位错段的等效质量; B_z 为黏性阻尼系数, f 为位错段的受力。

2.2 高应变率下的位错形核

随着加载应变率的增加,主导变形过程的位错机制会发生变化,合理引入初始的位错缺陷(包括均匀形核过程和非均匀形核过程)对模拟动态变形行为的准确性十分重要。Shehadeh 等^[41]通过基于 DDD 的多尺度计算模型研究了冲击载荷下位错的均匀形核和增殖过程,结果表明:位错的均匀形核是冲击载荷下主导材料动力学行为的位错机制,而且随着变形的持续进行,材料最终会达到一种静水压的载荷状态。Gurrutxaga-Lerma 等^[42]探讨了不同应变率加载下($10 \sim 10^{10} \text{ s}^{-1}$) Frank-Read 位错源的开动过程,结果表明当加载应变率高于 $5 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 时,位错的均匀形核过程将会先于 Frank-Read 源开动; Gurrutxaga-Lerma 等^[43]通过对两种形核过程进行进一步统计,发现均匀形核对应的位错数目高于 Frank-Read 位错源两个数量级,并详细探讨了几种典型金属材料(铝、铁、镍与钼)在冲击载荷下的动态响应,建立了位错微结构演化规律与动态力学响应之间的关联。McDowell 等^[44-45]通过 MD 方法系统地研究了单晶铜中的位错均匀形核过程,并结合参数化的位错密度演化模型^[46-48]对动态冲击问题展开了大量研究。尽管诸多研究者都认识到在冲击载荷下位错形核的重要作用,但是在模拟过程中,常常都是通过人为预设位错源数目的方式引入位错均匀形核过程的,这一过程仍有待更加深入的探讨。

通过采用考虑惯性效应的位错运动方程以及在模型中引入基于 MD 模拟得到的位错表面形核判据^[4], Hu 等^[49]通过位错动力学方法系统研究了单晶微柱在不同应变率下的力学响应以及对应的微结构演化规律,并建立了预测单晶微柱中流动应力的解析模型,且结合该模型系统地分析了单晶微柱中位错源数目的影响,给出了亚微米单晶柱变形的超曲面相图。

2.3 高应变率伴随的高温效应

冲击波压缩引起的温度升高可以从热力学定律出发加以推导^[50],但是在现有的位错动力学方法中还鲜有考虑。Shehadeh 等^[41]和 Hu 等^[51]考虑了动态冲击过程中剧烈塑性变形引起的热效应。在冲击载荷作用下,波阵面上的材料先经历弹性变形后经历塑性变形过程。在塑性变形过程中,位错会在极短时间内剧烈运动产生大量塑性功,这些塑性功会转化成材料的内能,从而导致局部温度升高。因此,变形过程中的能量转化

$$\rho c \dot{T}_w = \lambda_t \nabla^2 T_w + \gamma \cdot (\boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p) \quad (8)$$

式中: ρ 为材料密度, T_w 为温度, c 和 λ_t 分别为材料比热容和热传导系数, γ 代表塑性功转化为内能的比例因子, $\boldsymbol{\sigma}$ 为应力张量, $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p$ 为由位错运动产生的塑性应变率。

通过计算材料域内的温度场可得材料的热弹性本构关系

$$\dot{\boldsymbol{\sigma}} = \mathbf{C}^e : (\dot{\boldsymbol{\epsilon}} - \dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p) + \beta_t \dot{T}_w \cdot \mathbf{I} \quad (9)$$

式中: $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$ 为应力率张量, $\mathbf{C}^e$ 为材料的弹性模量张量, $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ 和 $\dot{\boldsymbol{\epsilon}}^p$ 分别为总应变率张量和塑性应变率张量, $\dot{T}_w$ 为温度变化率, $\mathbf{I}$ 为单位矩阵。 β_t 为热相关的材料常数,表示为

$$\beta_t = -\frac{E\alpha}{1-2\nu} \quad (10)$$

式中: E 、 ν 和 α 分别为材料的杨氏模量、泊松比和线膨胀系数。最后, 在统一的连续介质框架下, 利用 FEM 求解动量方程

$$\mathbf{M}\dot{\mathbf{U}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{F} \quad (11)$$

式中: $\mathbf{M}$ 、 $\mathbf{C}$ 、 $\mathbf{K}$ 分别为质量矩阵、阻尼矩阵和刚度矩阵, $\mathbf{U}$ 为节点位移, $\mathbf{F}$ 为力矢量。

Hu 等^[51] 在图 4(b) 的计算框架基础上, 利用 FEM 求解了温度场的演化, 传递给 DDD 实现了对动态冲击过程的有效计算。此外, 通过系统的 MD 模拟得到了位错均匀形核的相关参数, 并通过粗粒化方法将这一位错形核过程引入到耦合模型的计算中。通过该耦合模型研究了单晶铜柱在不同冲击载荷下的动态力学行为, 如图 5 所示, 模拟结果能够有效捕捉冲击载荷下一些典型的位错微结构, 如亚稳态位错环和位错增殖形成的剪切带等。

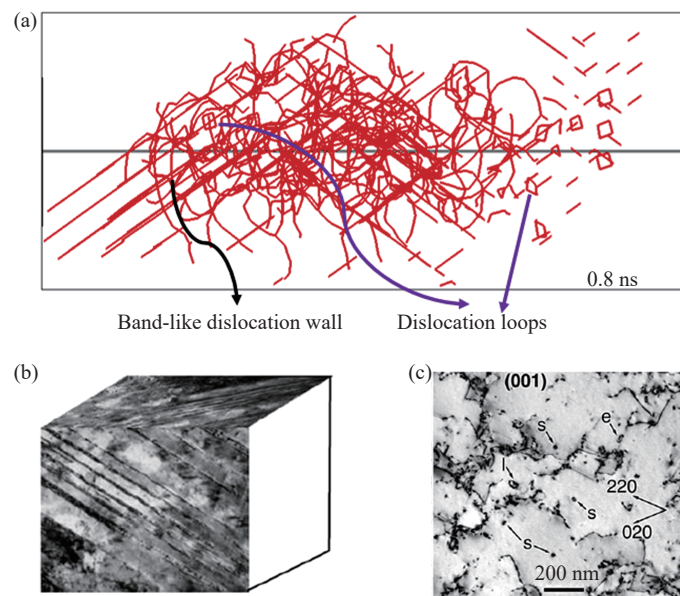


图 5 冲击载荷下的典型位错微结构: (a)DDD-FEM 模拟结果^[51]; (b)实验中观测到的剪切带^[52]; (c)位错线缺陷与位错环结构^[53]

Fig. 5 Typical dislocation microstructure under shock loading: (a) DDD-FEM simulation results^[51](a); (b) shear bands observed in experiments^[52]; (c) dislocation lines and loops microstructure^[53]

在冲击波加载过程中, 冲击波波阵面上的位错形核与增殖会使应力水平有所衰减。Gurrutxaga 等^[54] 通过基于位错动力学的多尺度耦合模型研究了不同应变率加载下冲击波波阵面上的应力衰减与位错密度变化过程, 如图 6 所示, 研究表明弹性前驱的衰减与冲击波前沿的位错形核密切相关。模拟结果定量地讨论这一相关性并与实验结果对比良好。值得一提的是, 在位错动力学模拟中, 考虑到位错的高速运动, Gurrutxaga-Lerma 等考虑了位错的动态应力场。随后, Gurrutxaga-Lerma 等^[55] 通过该方法进一步研究了在两种典型的面心立方 (FCC) 与体心立方 (BCC) 材料中, 温度对弹性前驱衰减的影响。需要指出, 上述面向高应变率问题的研究过程中, 往往只考虑了温度效应对于位错滑移过程的影响, 在第 3 节中将进一步展示高温下位错也将借助攀移产生塑性变形。

2.4 高应变率伴随的高压效应

金属材料在高压下也表现出不同的力学行为, 但是目前的研究仍然比较有限。Yang 等^[56] 从原子尺度出发, 建立了研究极端高压条件下单晶塑性变形的多尺度模型, 并通过 ParaDis(一套开源 DDD 程序) 研究了 Ta、Mo 等金属材料在不同压强、温度下的流动应力, 其中单晶 Mo 材料的力学响应如图 7 所示。一方面, 单晶 Mo 的屈服强度随着温度的升高而降低; 另一方面, 静水压可提升流动应力和模量。Hu 等^[57] 通过位错动力学研究了静水压加载下位错密度的演化和位错结构特点, 结果表明: 加载率

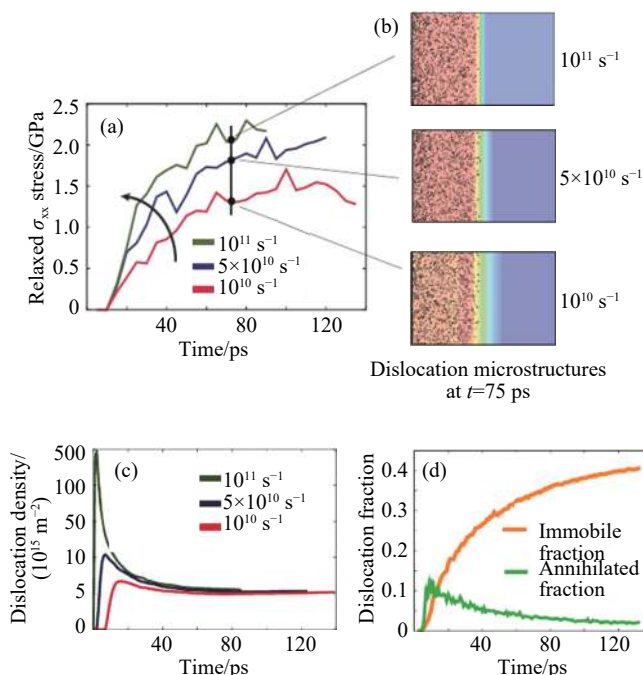


图 6 (a) 冲击方向应力衰减, (b) 不同加载率下加载时间为 75 ps 时的位错微结构演化, (c) 位错密度随时间的演化, (d) 应变率为 10^{10} s^{-1} 时不可动位错和湮灭位错^[54]

Fig. 6 (a) stress attenuation in the direction of shock loading, (b) evolution of dislocation microstructure at 75 ps under different loading rates, (c) evolution of dislocation density, (d) immobile and annihilated dislocations under strain rate of 10^{10} s^{-1} ^[54]

对位错密度的演化及最终稳定位错密度存在一定的影响, 且静水压下位错的形态与单轴压下存在明显的区别。

2.5 超高应变率下位错的弹性动力学效应

在极高应变率加载下, 位错速度接近声速 (亚声速位错), 与位错自身应力场的传播速度相当。因此, 基于位错的准静态弹性解来描述位错的长程和短程相互作用已经不再适用^[58-61]。单纯引入惯性项已经无法描述超高应变率下的亚声速位错行为。就像接近光速的粒子会呈现相对论效应, 亚声速位错也会产生类似的相对论效应, 与低速位错的物理机制截然不同。此时, 必须考虑位错的弹性动力学应力场。最近的研究表明: 弹性波和位错的弹性动力场之间的相互作用可以解释弹性波波前的衰减^[54], 入射平面波激活的位错解的叠加可用于确定波振幅的衰减^[62]。

针对位错的弹性动力学场的研究早在 1949 年就已经展开, 但是增加时间维度带来了显著的理论和计算复杂性, 因此现有研究多局限于二维问题^[56, 58]。Xiong 等^[60]通过粗粒化二维的 MD 模拟结果, 建立了原子-连续介质方法来研究弹性动力学效应的影响。Gurrutxaga-Lerma 等^[61]建立了考虑弹性动力学框架的二维位错动力学方法, 揭示了一对纯刃型位错的相互作用机理。然而, 二维计算方法无法揭示真实的三维位错结构的演化规律, 及其长程和短程相互作用机理。

时至今日, 真实的弹性动力学场下的三维缺陷相互作用机制这一基本科学问题尚无答案。为解决这一问题, Cui 等^[63]基于迟滞位错思想来处理耦合的时空积分, 推导了任意三维位错环在弹性动力学

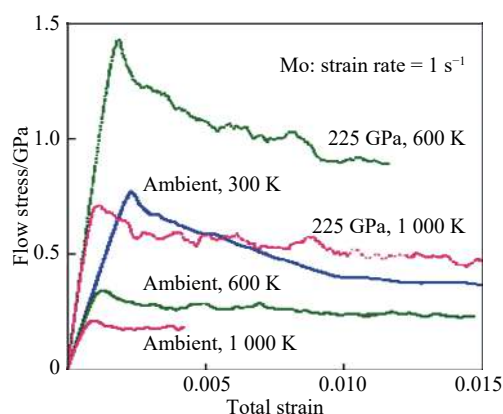


图 7 单晶 Mo 在不同温度、压强下的应力-应变曲线^[56]

Fig. 7 Stress-strain curves of single crystal Mo under different temperatures and pressures^[56]

场下的位移、应变、应力等的理论解,继而首次建立了三维位错弹性动力学方法。如图 8 所示,该方法有效捕捉了三维位错环的弹性动力学应力场分布的历史依赖性。在弹性动力学场下,经典的位错理论已经不再适用。比如,两个异号的位错环并不一定永远互相吸引,其相互作用力的大小和符号都呈现显著的历史依赖性^[63]。三维位错弹性动力学理论的进一步发展有望带来颠覆传统认知的新的位错理论和动态变形理论。

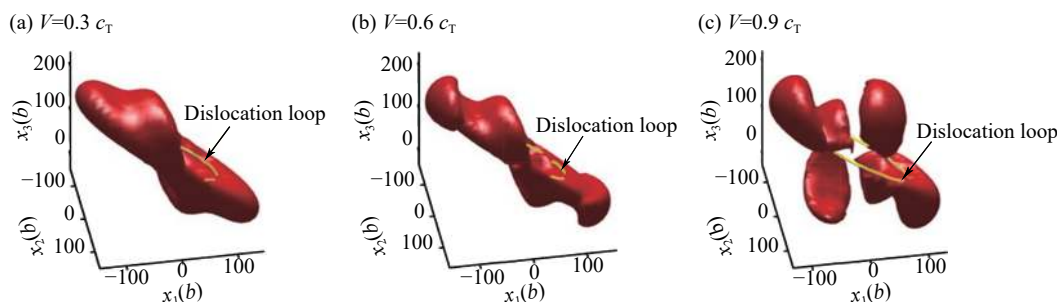


图 8 亚音速位错环应力场 σ_{11} 的等值面 (V 为位错环的扩张速度, c_T 为横向声速^[63])

Fig. 8 Isosurface of stress component σ_{11} of subsonic dislocation

(V is dislocation velocity, c_T is transverse wave speed^[63])

3 位错动力学在高温位错攀移问题上的研究进展

研究金属材料的高温力学行为对材料的设计与加工、航空航天装备、军事工程设计以及安全防护等诸多领域均具有重要意义。强动载荷下,由于存在大量的塑性热,材料局域也会进入高温高压状态。高温热激活作用使得金属的物理和力学性能相比常温情况下发生显著改变,这给获得材料在高温下的微结构演化规律带来了极大挑战。研究早期,高温下晶体塑性形变理论模型的建立主要依赖于唯象的方法^[64],相关模型并不能体现热激活条件下微结构演化速率的温度和时间依赖性。对此,Amodeo 等^[65]在唯象假设基础上建立了热激活的攀移运动与外加应力和温度的函数关系,研究了位错运动的动态响应。

DDD 方法为理解高温变形机理提供了新的机遇。在热激活作用下,由于晶格中点缺陷的形成能和迁移能大大降低,点缺陷浓度和扩散速率显著提高。位错线可以通过吸收或释放这些点缺陷来实现垂直于晶体滑移面方向的非保守运动——位错攀移^[66],如图 9 所示。这种垂直滑移面方向的攀移运动对高温^[67-68]甚至常温^[69-71]下的晶体塑性行为有非常重要的影响。在过去的几十年间,位错的攀移过程引起了研究者的广泛关注^[66,72]。

作为一种热激活运动,位错攀移明显区别于位错滑移。首先,位错攀移发生在垂直于滑移面方向,相比于滑移需要更高的激活能;其次,由于攀移过程伴随着物质的迁移,是点缺陷与线缺陷耦合作用的结果,因此攀移过程受点缺陷扩散速率主导^[73];此外,由于扩散过程通常比较缓慢,并且受限于温度、点缺陷浓度等因素,而位错滑移速率接近于材料的剪切波速,导致攀移与滑移在运动速率上存在高达 $10^5 \sim 10^{10}$ 的巨大差异^[74]。因此,位错攀移的出现,使得高温热激活下晶体材料的力学行为具有明显的多物理场、多时间尺度特性:在空间上,涉及点缺陷扩散场与应力场的相互作用;在时间上,同时跨越多个时间尺度。这种由攀移带来的多物理场、多时间尺度特性也给热激活下晶体塑性形变规律的研究带来了极大的挑战。在 DDD 中引入位错攀移机制主要需要解决两个问题:(1) 如何解决位错滑移、攀移两种运动形式在时间尺度上数量级差异的难题,在统一框架下进行计算;(2) 如何建立准确的基于物理机制的攀移模型,将点缺陷扩散与位错攀移运动耦合起来^[74-76]。

对于位错攀移和滑移速率在时间尺度上的巨大差异问题,研究者主要提出以下几种解决方案:在最早的唯一法中,研究者们将攀移的黏滞力系数作为参数,讨论攀移速率大小对塑性行为的影响,但是这种方法并不物理,不能真正描述攀移的影响^[77]。此后,采用顺序耦合的方式来计算,即攀移一个时间

增量步然后滑移一个时间增量步,其中攀移时间增量步较大,滑移较小^[73]。或者为了方便计算,直接将攀移速率放大至与滑移速率相当^[79],然后二者叠加来进行计算。这两种方法都一定程度上放大了攀移的作用,难以准确描述攀移的实际影响。此外,有学者提出自适应时间增量步的方法^[74, 76, 80-81]:让位错线先进行滑移,此时采用较小的时间增量;当滑移受到塞积,位错开始攀移,此时采用较大的时间增量;当位错攀移到新的滑移面,再开始滑移,如此循环。该方法对于处理局部区域的塞积等问题,计算效率较高,但是在较大规模计算中,位错线并不一定同时发生塞积,需要较长的等待时间,因此一定程度上弱化了攀移作用。

对于在DDD中引入位错攀移机制的问题,Mordehai等^[79, 82]首次将空位扩散机制引入DDD中,将位错线看作空位的源或汇,通过求解无限长直位错线周围空位的柱状扩散方程获得位错攀移速率,然后基于DDD建立了离散位错攀移模型。Bakó等^[75]通过计算攀移对模型中平均空位浓度的影响,对上述模型进行了修正。Gao等^[83-84]又进一步将这种方法扩展到空位管扩散主导的位错攀移过程,并在后续工作中建立了可同时考虑管扩散和体扩散的攀移模型。Clouet^[85]通过对比上述攀移模型与原子模拟得到的攀移速率,证明在一定位错密度下,上述攀移模型在一定范围内能够准确高效地模拟位错的攀移运动。

近年来,该方法被广泛应用于定性解释一系列攀移相关的力学行为。Huang等^[86-87]利用此方法研究了高温下位错攀移对蠕变速率以及多晶体晶粒尺寸效应的影响;Davoudi等^[77]则利用此方法研究了高温下位错攀移对Au薄膜中流动应力的影响。然而,上述模型均利用了位错线周围点缺陷柱状扩散的解析解,而在得到这一解析解的过程,通常需要假设:(1)单根直位错线,(2)位错线无限长,(3)位错线周围点缺陷满足稳态柱状扩散。因此,此类模型对于任意形状位错线并不适用,而且模型中仅考虑扩散的短程作用,对于位错线周围空位扩散对邻近位错线运动的影响并未考虑,是一种仅适用于位错密度较低情况的“局部”模型。对此,Gu等^[81]考虑了扩散的长程作用,建立了基于格林函数公式的位错攀移的全局模型,适用于任意密度、任意形状的位错线,并证明了局部模型在位错密度较高情况下的局限性。Keralavarma等^[74]建立了2D-DDD与FEM结合的模型,利用FEM求解空位扩散方程,2D-DDD求解位错微结构的演化,同时考虑位错攀移与滑移,是在以上计算模型上的一大突破,但是在求解扩散方程时采用空位源均匀分布假设,不足以反映位错运动对空位扩散的影响,而且二维模型对于真实情况的模拟有很大局限性。此外,上述基于位错动力学的离散位错塑性描述需要精确到每一条位错线的演化,计算量巨大且难以进行定量表征。对此,Geers等^[73]扩展了传统的晶体塑性理论,在位错运动方程中加入垂直滑移面方向的攀移,在本构方程中加入攀移引起的塑性应变率,同时考虑位错攀移和滑移对塑性形变的贡献。此外,采用局部-全局模型来描述位错运动后晶体中空位浓度的重分配,一定程度上阐述了亚微米尺度晶体塑性变形理论,但是该模型仍仅适用于二维情况,对于三维实际情况的模拟具有很大局限性。Ghoniem等^[88]通过开发三维参数化位错动力学(PDD),在Gibbs自由能中引入能够反映点缺陷吸收与扩散的化学势,来处理热激活下的位错构型演化。

Liu等^[78, 89]建立了攀移-滑移全耦合的三维离散-连续位错理论模型和数值方法。在图4(b)所示模型的基础上,增加了两个变量传递过程,如图10所示:(1)利用DDD求解位错段的受力,进而求解其对应的平衡空位浓度 c_{eq}^i 。然后将位错段周围平

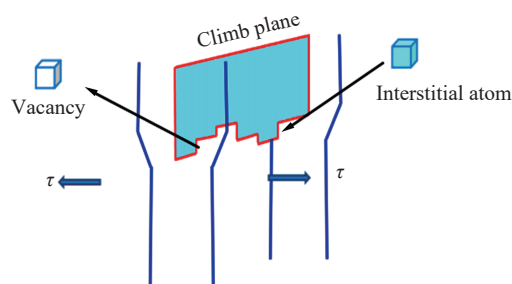


图9 多余半原子面发生攀移运动的示意图^[78]

Fig. 9 Schematic showing the climb of edge dislocation^[78]

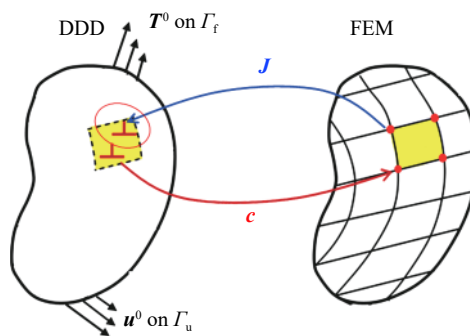


图10 离散-连续位错攀移模型中参数传递示意图^[89]

Fig. 10 Schematically showing the variable transferring in discrete-continuous climb model^[89]

衡空位浓度局部化分配至 FEM 中单元节点上, 作为空位扩散的初始值与边界条件; (2) 根据相应内部与外部边界条件, 在连续介质力学框架中, 利用 FEM 求解空位扩散方程, 得到位错核心周围的空位体积通量 J_v , 并将其传递至 DDD 中位错段上, 用以求解位错攀移速率, 进而在 DDD 中模拟位错攀移过程。Liu 等利用该方法诠释了 Au 单晶柱应变软化和高温退火硬化的反常规力学机制, 揭示了位错攀移对高温退火硬化的主导作用。

4 位错动力学在强辐照环境下的进展与应用

强辐照环境在核电站、核聚变能、空间推进技术等先进能源与动力装置中广泛存在。当材料或结构受到高能中子或离子等的强辐照作用后, 其内部产生大量的辐照缺陷。如图 11 所示, 在面心立方 (FCC) 晶体中, 典型的辐照缺陷是层错四边形 (SFT) 和间隙环; 在体心立方 (BCC) 晶体中, 主要是间隙环和纳米孔洞。这些辐照缺陷的存在带来了服役构件的辐照损伤、脆化、蠕变、肿胀、表面失稳等失效模式, 极大限制了装备的服役寿命。MD 只能研究非常少的辐照缺陷和材料中其他微结构的相互作用, 而连续介质力学往往只能在已有认知的基础上建立连续化描述, 难以揭示新的微观机理, 位错动力学方法的发展对理解强辐照环境下累积微结构相互作用主导的材料变形失效行为提供了有效的手段^[17,90]。

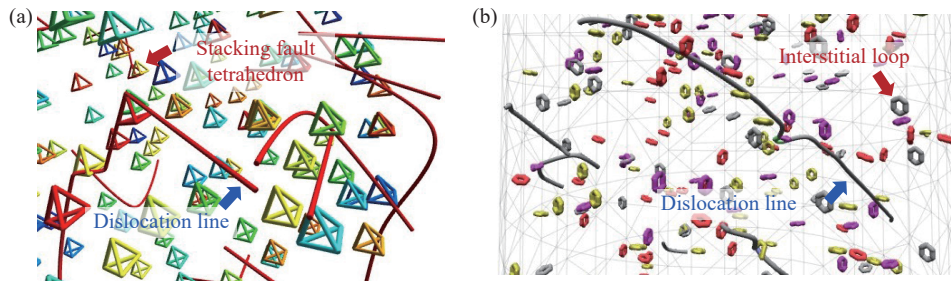


图 11 位错与辐照缺陷相互作用示例: (a) 在受辐照的 FCC 晶体中位错被层错四边形(SFT)截获, (b) 在受辐照的 BCC 晶体中位错与间隙位错环反应生成位错锁(不同颜色代表不同的柏氏矢量)^[16,91]

Fig. 11 Interaction between dislocation and irradiation defects: (a) trapping of dislocation by SFT in irradiated FCC crystal, (b) formation of dislocation lock due to the reaction between dislocation and interstitial loop in irradiated BCC crystal (Different colors represent different burgers vector)^[16,91]

在位错动力学框架下考虑辐照缺陷主要有 3 种思路^[17]。(1) 直接对辐照缺陷进行建模, 考虑离散的辐照缺陷与位错线之间的相互作用。这是 DDD 中引入辐照缺陷效应的最直接也最常用的处理方法, 为理解位错与辐照缺陷的相互作用提供了很多有价值的信息^[92-94]。研究发现, 当一个 SFT 被滑动位错扫过时, SFT 可能被剪切, 被部分吸收形成位错锁或完全回复^[91,95]。当一个间隙位错环被滑动位错扫过时, 如果它的柏氏矢量与扫过位错的柏氏矢量共面, 这个间隙位错环会被拖拽^[91]。否则, 这个间隙位错环可能与位错线发生反应, 继而形成位错锁, 此时间隙位错环可能被位错线完全吸收, 或留下一个具有不同柏氏矢量的位错环^[96]。该方法已经可以捕捉近原子级的位错-辐照缺陷相互作用机制^[91]。(2) 通过考虑单个辐照缺陷的应力场, 考虑其与位错的相互作用。比如基于无限小环近似, Ghoniem 等给出了棱柱形位错环的应力场公式, 基于此可推得间隙位错环产生的力和力矩^[17]。该方法相对第一种方法的计算效率更高, 但是捕捉微观机理的能力也有所下降。(3) 前两种方法在计算高剂量辐照材料时都需要非常大的计算成本, 因为此时辐照缺陷的数量密度达到 $10^{21} \sim 10^{22} \text{ m}^{-3}$ 。为解决这一问题, Cui 等^[97]提出了用连续化辐照缺陷场来描述辐照缺陷效应, 通过 FEM 求解辐照缺陷场的演化 (式 (13)), 然后传递给 DDD, 考虑其对位错运动和变形行为的影响 (式 (12))。为此, 他们发展了两个模型来耦合离散位错和连续辐照缺陷场: 第 1 个模型是辐照硬化模型

$$\tau = k\mu b \sqrt{Na} \quad (12)$$

式中: τ 是辐照缺陷引起的滑移阻力; μ 是剪切模量; b 是柏氏矢量; N 是辐照缺陷数量密度; a 是辐照缺

陷尺寸; k 是无量纲系数, 依赖于缺陷强度和分布, 借助大量离散位错和离散辐照缺陷计算结果的统计分析得到^[97-99]。第2个是辐照缺陷密度和尺寸演化的动力学模型。该模型可以考虑位错与辐照缺陷的相互作用。研究表明, 当辐照缺陷与滑动位错的距离小于 $y/2$ 时, 可能会被吸收或拖拽^[100-102]。因此, 滑动位错引起的辐照缺陷破坏率可以表示为^[97]

$$\Delta N - \Delta N_s = -\lambda N \frac{y \Delta A}{V} \quad (13)$$

式中: ΔN 是辐照缺陷数量变化值, ΔN_s 是辐照缺陷产生率, ΔA 是位错滑移面积增量, V 是特征体积, λ 是辐照缺陷破坏系数。 λy 的值可以通过拟合应力-应变曲线得到^[103], 也可以通过 DDD 与离散辐照缺陷耦合的计算得到^[97]。

这一杂化方法为研究高剂量辐照材料的塑性失稳问题提供了新的机遇。比如, 辐照脆化问题中非常经典的“位错通道”形成(如图12所示, 有时也称为“无辐照缺陷通道”)问题得以系统化的研究。基于此, Cui 等^[104]提出了定量表征任意复杂三维变形的局部化程度及其空间关联性的方法, 建立了预测辐照材料中典型的位错通道形成及其宽化的理论模型, 有效预测了辐照条件及关键微结构参数影响下的塑性失稳相图^[105]。相关研究对于设计抗辐照材料及核安全应用具有指导意义。

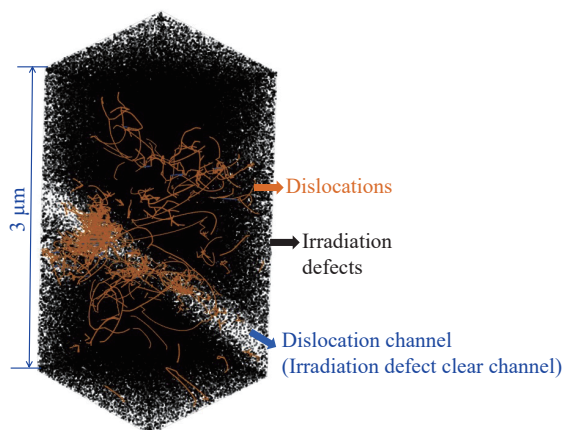


图12 位错动力学与辐照缺陷场耦合计算高剂量辐照材料中的位错通道形成^[97]

Fig. 12 Formation of dislocation channel in high-dose irradiated material calculated by DDD coupled with irradiation defect fields^[97]

5 结 论

极端环境下材料与结构的变形破坏问题是一个涉及多时空尺度耦合、多物理场耦合的复杂问题。迄今为止, 研究者在纳观尺度和宏观尺度开展的计算研究较多, 可以基于较为成熟的商业软件开展研究。然而, 在微介观尺度, 尚无成熟的商业软件, 研究成熟度也最低。位错动力学方法作为联系纳观尺度和宏观尺度的桥梁, 是揭示位错主导的材料塑性变形及失效行为的强有力手段。通过与连续介质有限元方法的耦合, 位错动力学方法的应用领域不断拓展, 从单纯的力学行为研究, 发展到多物理场耦合行为的研究。

本文分别针对高应变率、高温、强辐照几种极端环境, 系统介绍了位错动力学方法的发展思路、研究进展及其对理解微观机理、发展理论模型上的贡献。极端环境下材料与结构的变形失效问题仍有诸多尚未解决的难题, 迫切需要进一步发展 DDD 及其与其他方法的耦合算法, 为理解极端环境下的变形破坏机理建立连续化理论预测模型提供强有力的工具。

参考文献:

- [1] ZUO L, NGAN A H. Molecular dynamics study on compressive yield strength in Ni_3Al micro-Pillars [J]. *Philosophical Magazine Letters*, 2006, 86(6): 355–365.
- [2] ZHOU S J, PRESTON D L, LOMDAHL P S, et al. Large-scale molecular dynamics simulations of dislocation intersection in copper [J]. *Science*, 1998, 279(5356): 1525–1527.
- [3] XU S, GUO Y F, NGAN A H W. A molecular dynamics study on the orientation, size, and dislocation confinement effects on the plastic deformation of Al nanopillars [J]. *International Journal of Plasticity*, 2013, 43: 116–127.
- [4] ZHU T, LI J, SAMANTA A, et al. Temperature and strain-rate dependence of surface dislocation nucleation [J]. *Physical*

- [Review Letters](#), 2008, 100(2): 025502.
- [5] LIU X Y, BİNER S B. Molecular dynamics simulations of the interactions between screw dislocations and self-interstitial clusters in body-centered cubic Fe [J]. [Scripta Materialia](#), 2008, 59(1): 51–54.
- [6] HUANG Y. Multiscale modeling of dislocation-based crystal plasticity within a multiphysics framework [D]. Los Angeles: University of California, 2018.
- [7] HUANG Y, GAO H, NIX W D, et al. Mechanism-based strain gradient plasticity: II analysis [J]. [Journal of the Mechanics and Physics of Solids](#), 2000, 48(1): 99–128.
- [8] WANG H, HWANG K C, HUANG Y, et al. A conventional theory of strain gradient crystal plasticity based on the Taylor dislocation model [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2007, 23(9): 1540–1554.
- [9] BAYLEY C J, BREKELMANS W A M, GEERS M G D. A comparison of dislocation induced back stress formulations in strain gradient crystal plasticity [J]. [International Journal of Solids and Structures](#), 2006, 43(24): 7268–7286.
- [10] BITTENCOURT E. Dynamic explicit solution for higher-order crystal plasticity theories [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2014, 53: 1–16.
- [11] ROTERS F, EISENLOHR P, HANTCHERLI L, et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: theory, experiments, applications [J]. [Acta Materialia](#), 2010, 58(4): 1152–1211.
- [12] LIU Z L, LIU X M, ZHUANG Z, et al. A multi-scale computational model of crystal plasticity at submicron-to-nanometer scales [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2009, 25(8): 1436–1455.
- [13] VBULATOV W C. Computer simulations of dislocations [M]. New York: Oxford University Press, 2006, 196–240.
- [14] CUI Y N, LIN P, LIU Z L, et al. Theoretical and numerical investigations of single arm dislocation source controlled plastic flow in FCC micropillars [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2014, 55: 279–292.
- [15] CUI Y N. The investigation of plastic behavior by discrete dislocation dynamics for single crystal pillar at submicron scale [M]. Singapore: Springer Singapore, 2017.
- [16] ZHUANG Z, LIU Z, CUI Y. Dislocation mechanism-based crystal plasticity: theory and computation at the micron and submicron scale [M]. Academic Press, 2019.
- [17] GHONIEM N M, CUI Y N. Dislocation dynamics simulations of defects in irradiated materials [M]//Reference Module in Materials Science and Materials Engineering. Elsevier, 2019.
- [18] FOREMAN A J E. Junction reaction hardening by dislocation loops [J]. [Philosophical Magazine](#), 1968, 17(146): 353–364.
- [19] DESHPANDE V S, NEEDLEMAN A, GIESSEN V D E. Finite strain discrete dislocation plasticity [J]. [Journal of the Mechanics and Physics of Solids](#), 2003, 51(11/12): 2057–2083.
- [20] DESHPANDE V S, NEEDLEMAN A, GIESSEN V D E. Plasticity size effects in tension and compression of single crystals [J]. [Journal of the Mechanics and Physics of Solids](#), 2005, 53(12): 2661–2691.
- [21] OUYANG C J, LI Z H, HUANG M S, et al. Combined influences of micro-pillar geometry and substrate constraint on microplastic behavior of compressed single-crystal micro-pillar: two-dimensional discrete dislocation dynamics modeling [J]. [Materials Science and Engineering A](#), 2009, 526(1/2): 235–243.
- [22] OUYANG C J, LI Z H, HUANG M S, et al. Cylindrical nano-indentation on metal film/elastic substrate system with discrete dislocation plasticity analysis: a simple model for nano-indentation size effect [J]. [International Journal of Solids and Structures](#), 2010, 47(22/23): 3103–3114.
- [23] HUANG M S, TONG J, LI Z H. A study of fatigue crack tip characteristics using discrete dislocation dynamics [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2014, 54: 229–246.
- [24] BENZERGA A A, BRCHET Y, NEEDLEMAN A, et al. Incorporating three-dimensional mechanisms into two-dimensional dislocation dynamics [J]. [Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering](#), 2004, 12(1): 159–196.
- [25] BENZERGA A A. Micro-pillar plasticity: 2.5D mesoscopic simulations [J]. [Journal of the Mechanics and Physics of Solids](#), 2009, 57(9): 1459–1469.
- [26] KUBIN L P, CANOVA G, CONDAT M, et al. Dislocation microstructures and plastic flow: a 3D simulation [J]. [Solid State Phenomena](#), 1992, 23/24: 455–472.
- [27] BULATOV V V, CAI W. Computer simulations of dislocations [M]. New York: Oxford University Press, 2006.
- [28] EL-AWADY J A, BULENT BİNER S, GHONIEM N M. A self-consistent boundary element, parametric dislocation dynamics

- formulation of plastic flow in finite volumes [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(5): 2019–2035.
- [29] ZBIB H M, DIAZ DE LA RUBIA T, BULATOV V. A multiscale model of plasticity based on discrete dislocation dynamics [J]. *Journal of Engineering Materials and Technology*, 2002, 124(1): 78–87.
- [30] GIESSEN E V D, NEEDLEMAN A. Discrete dislocation plasticity: a simple planar model [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1995, 3(5): 689–735.
- [31] ZHOU C Z, BINER S B, LESAR R. Discrete dislocation dynamics simulations of plasticity at small scales [J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(5): 1565–1577.
- [32] VATTRÉ A, DEVINCRE B, FEYEL F, et al. Modelling crystal plasticity by 3D dislocation dynamics and the finite element method: the discrete-continuous model revisited [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 63: 491–505.
- [33] CUI Y N, LIU Z L, ZHUANG Z. Quantitative investigations on dislocation based discrete-continuous model of crystal plasticity at submicron scale [J]. *International Journal of Plasticity*, 2015, 69: 54–72.
- [34] ZBIB H M, DIAZ DE LA RUBIA T. A multiscale model of plasticity [J]. *International Journal of Plasticity*, 2002, 18(9): 1133–1163.
- [35] LEMARCHAND C, DEVINCRE B, KUBIN L P. Homogenization method for a discrete-continuum simulation of dislocation dynamics [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(9): 1969–1982.
- [36] GAO Y, LIU Z L, YOU X C, et al. A hybrid multiscale computational framework of crystal plasticity at submicron scales [J]. *Computational Materials Science*, 2010, 49(3): 672–681.
- [37] CUI Y N, LIU Z L, ZHUANG Z. Theoretical and numerical investigations on confined plasticity in micropillars [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, 76: 127–143.
- [38] HIRTH J P, ZBIB H M, LOTHE J. Forces on high velocity dislocations [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1998, 6(2): 165–169.
- [39] GURRUTXAGA-LERMA B. The role of the mobility law of dislocations in the plastic response of shock loaded pure metals [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, 24(6): 065006.
- [40] WANG Z Q, BEYERLEIN I J, LESAR R. Dislocation motion in high strain-rate deformation [J]. *Philosophical Magazine*, 2007, 87(16): 2263–2279.
- [41] SHEHADEH M A, BRINGA E M, ZBIB H M, et al. Simulation of shock-induced plasticity including homogeneous and heterogeneous dislocation nucleations [J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 89(17): 171918.
- [42] GURRUTXAGA-LERMA B, BALINT D S, DINI D, et al. The mechanisms governing the activation of dislocation sources in aluminum at different strain rates [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, 84: 273–292.
- [43] GURRUTXAGA-LERMA B, BALINT D S, DINI D, et al. The role of homogeneous nucleation in planar dynamic discrete dislocation plasticity [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 2015, 82(7): 071008.
- [44] TSCHOPP M A, SPEAROT D E, MCDOWELL D L. Atomistic simulations of homogeneous dislocation nucleation in single crystal copper [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2007, 15(7): 693–709.
- [45] SPEAROT D E, TSCHOPP M A, MCDOWELL D L. Orientation and rate dependence of dislocation nucleation stress computed using molecular dynamics [J]. *Scripta Materialia*, 2009, 60(8): 675–678.
- [46] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of fcc metals at very high strain rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27(1): 1–24.
- [47] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. Parameterization of a rate-dependent model of shock-induced plasticity for copper, nickel, and aluminum [J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 32/33: 134–154.
- [48] LLOYD J T, CLAYTON J D, AUSTIN R A, et al. Plane wave simulation of elastic-viscoplastic single crystals [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 69: 14–32.
- [49] HU J Q, LIU Z L, VAN DER GIESSEN E, et al. Strain rate effects on the plastic flow in submicron copper Pillars: considering the influence of sample size and dislocation nucleation [J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2017, 17: 33–37.
- [50] MEYERS M A. *Dynamic behavior of materials* [M]. New York, USA: John Wiley & Sons, 1994.
- [51] HU J Q, LIU Z L, CHEN K G, et al. Investigations of shock-induced deformation and dislocation mechanism by a multiscale discrete dislocation plasticity model [J]. *Computational Materials Science*, 2017, 131: 78–85.
- [52] CAO B Y, BRINGA E M, MEYERS M A. Shock compression of monocrystalline copper: atomistic simulations [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2007, 38(11): 2681–2688.

- [53] MEYERS M A, GREGORI F, KAD B K, et al. Laser-induced shock compression of monocrystalline copper: characterization and analysis [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(5): 1211–1228.
- [54] GURRUTXAGA-LERMA B, BALINT D S, DINI D, et al. Attenuation of the dynamic yield point of shocked aluminum using elastodynamic simulations of dislocation dynamics [J]. *Physical Review Letters*, 2015, 114(17): 174301.
- [55] GURRUTXAGA-LERMA B, SHEHADEH M A, BALINT D S, et al. The effect of temperature on the elastic precursor decay in shock loaded FCC aluminium and BCC iron [J]. *International Journal of Plasticity*, 2017, 96: 135–155.
- [56] YANG L H, TANG M J, MORIARTY J A. Chapter 92 dislocations and plasticity in bcc transition metals at high pressure [M]//Dislocations in Solids. Elsevier, 2010: 1–46.
- [57] HU J Q, CHEN Z, LIU Z L, et al. Pressure sensitivity of dislocation density in copper single crystals at submicron scale [J]. *Materials Research Express*, 2018, 5(1): 016504.
- [58] LAZAR M, PELLEGRINI Y P. Distributional and regularized radiation fields of non-uniformly moving straight dislocations, and elastodynamic Tamm problem [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2016, 96: 632–659.
- [59] NI L, MARKENSCOFF X. The self-force and effective mass of a generally accelerating dislocation I : screw dislocation [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(4): 1348–1379.
- [60] XIONG L M, RIGELSAIYIN J, CHEN X, et al. Coarse-grained elastodynamics of fast moving dislocations [J]. *Acta Materialia*, 2016, 104: 143–155.
- [61] GURRUTXAGA-LERMA B, BALINT D S, DINI D, et al. A dynamic discrete dislocation plasticity method for the simulation of plastic relaxation under shock loading [J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2013, 469(2156): 20130141.
- [62] CLIFTON R J, MARKENSCOFF X. Elastic precursor decay and radiation from nonuniformly moving dislocations [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1981, 29(3): 227–251.
- [63] CUI Y N, PO G, PELLEGRINI Y P, et al. Computational 3-dimensional dislocation elastodynamics [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2019, 126: 20–51.
- [64] ARGON A, PRINZ F, MOFFATT W. Dislocation creep in subgrain-forming pure metals and alloys [J]. *Creep and Fracture of Engineering Materials and Structures*, 1981: 1–15.
- [65] AMODEO R J, GHONIEM N M. Dislocation dynamics. I . a proposed methodology for deformation micromechanics [J]. *Physical Review B*, 1990, 41(10): 6958.
- [66] CAILLARD D, MARTIN J L. Thermally activated mechanisms in crystal plasticity [M]. The Netherlands: Elsevier, 2003.
- [67] FERRONI F, YI X O, ARAKAWA K, et al. High temperature annealing of ion irradiated tungsten [J]. *Acta Materialia*, 2015, 90: 380–393.
- [68] MURAKUMO T, KOBAYASHI T, KOIZUMI Y, et al. Creep behaviour of Ni-base single-crystal superalloys with various γ' volume fraction [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(12): 3737–3744.
- [69] WANG J, HOAGLAND R G, MISRA A. Room-temperature dislocation climb in metallic interfaces [J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(13): 131910.
- [70] LEE G, KIM J Y, BUREK M J, et al. Plastic deformation of indium nanostructures [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2011, 528(19/20): 6112–6120.
- [71] ASHKENAZY Y, AVERBACK R S. Irradiation induced grain boundary flow: a new creep mechanism at the nanoscale [J]. *Nano Letters*, 2012, 12(8): 4084–4089.
- [72] HIRTH J P, LOTHE J. Theory of dislocations [M]. 2nd ed. New York: Wiley, 1982: 1–800.
- [73] GEERS M G D, COTTURA M, APPOLAIRE B, et al. Coupled glide-climb diffusion-enhanced crystal plasticity [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 70: 136–153.
- [74] KERALAVARMA S M, CAGIN T, ARSENLIS A, et al. Power-law creep from discrete dislocation dynamics [J]. *Physical Review Letters*, 2012, 109(26): 265504.
- [75] BAKÓ B, CLOUET E, DUPUY L M, et al. Dislocation dynamics simulations with climb: kinetics of dislocation loop coarsening controlled by bulk diffusion [J]. *Philosophical Magazine*, 2011, 91(23): 3173–3191.
- [76] KERALAVARMA S M, BENZERGA A A. High-temperature discrete dislocation plasticity [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, 82: 1–22.
- [77] DAVOUDI K M, NICOLA L, VLASSAK J J. Dislocation climb in two-dimensional discrete dislocation dynamics [J]. *Journal*

- of *Applied Physics*, 2012, 111(10): 103522.
- [78] LIU F X, LIU Z L, LIN P, et al. Numerical investigations of helical dislocations based on coupled glide-climb model [J]. *International Journal of Plasticity*, 2017, 92: 2–18.
- [79] MORDEHAI D, CLOUET E, FIVEL M, et al. Annealing of dislocation loops in dislocation dynamics simulations [J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2009, 3: 012001.
- [80] AYAS C, DESHPANDE V. Climb enabled discrete dislocation plasticity of superalloys [J]. *Key Engineering Materials*, 2015, 651/652/653: 981–986.
- [81] GU Y J, XIANG Y, QUEK S S, et al. Three-dimensional formulation of dislocation climb [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, 83: 319–337.
- [82] MORDEHAI D, CLOUET E, FIVEL M, et al. Introducing dislocation climb by bulk diffusion in discrete dislocation dynamics [J]. *Philosophical Magazine*, 2008, 88(6): 899–925.
- [83] GAO Y, ZHUANG Z, LIU Z L, et al. Investigations of pipe-diffusion-based dislocation climb by discrete dislocation dynamics [J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27(7): 1055–1071.
- [84] GAO Y, ZHUANG Z, YOU X C. A study of dislocation climb model based on coupling the vacancy diffusion theory with 3d discrete dislocation dynamics [J]. *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, 2013, 11(1): 59–69.
- [85] CLOUET E. Predicting dislocation climb: classical modeling versus atomistic simulations [J]. *Physical Review B*, 2011, 84(9): 092106.
- [86] HUANG M S, LI Z H, TONG J. The influence of dislocation climb on the mechanical behavior of polycrystals and grain size effect at elevated temperature [J]. *International Journal of Plasticity*, 2014, 61: 112–127.
- [87] YANG H, HUANG M S, LI Z H. The influence of vacancies diffusion-induced dislocation climb on the creep and plasticity behaviors of nickel-based single crystal superalloy [J]. *Computational Materials Science*, 2015, 99: 348–360.
- [88] GHONIEM N M, TONG S H, SUN L Z. Parametric dislocation dynamics: a thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation [J]. *Physical Review B*, 2000, 61(2): 913.
- [89] LIU F X, LIU Z L, PEI X Y, et al. Modeling high temperature anneal hardening in Au submicron pillar by developing coupled dislocation glide-climb model [J]. *International Journal of Plasticity*, 2017, 99: 102–119.
- [90] MARIAN J, FITZGERALD S, PO G. Discrete dislocation dynamics simulations of irradiation hardening in nuclear materials [M]//Handbook of Materials Modeling. Cham: Springer International Publishing, 2018: 1–29.
- [91] CUI Y N, PO G, GHONIEM N. Does irradiation enhance or inhibit strain bursts at the submicron scale? [J]. *Acta Materialia*, 2017, 132: 285–297.
- [92] ARSENLIS A, RHEE M, HOMMES G, et al. A dislocation dynamics study of the transition from homogeneous to heterogeneous deformation in irradiated body-centered cubic iron [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(9): 3748–3757.
- [93] RUBIA T D D L, ZBIB H M, KHRAISHI T A, et al. Multiscale modelling of plastic flow localization in irradiated materials [J]. *Nature*, 2000, 406(6798): 871–874.
- [94] GHONIEM N M, TONG S H, SINGH B N, et al. On dislocation interaction with radiation-induced defect clusters and plastic flow localization in fcc metals [J]. *Philosophical Magazine A*, 2001, 81(11): 2743–2764.
- [95] OSETSKY Y N, RODNEY D, BACON D J. Atomic-scale study of dislocation-stacking fault tetrahedron interactions. Part I: mechanisms [J]. *Philosophical Magazine*, 2006, 86(16): 2295–2313.
- [96] TERYTYEV D, MONNET G, GRIGOREV P. Transfer of molecular dynamics data to dislocation dynamics to assess dislocation-dislocation loop interaction in iron [J]. *Scripta Materialia*, 2013, 69(8): 578–581.
- [97] CUI Y N, PO G, GHONIEM N M. A coupled dislocation dynamics-continuum barrier field model with application to irradiated materials [J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 104: 54–67.
- [98] SOBIE C, BERTIN N, CAPOLUNGO L. Analysis of obstacle hardening models using dislocation dynamics: application to irradiation-induced defects [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2015, 46(8): 3761–3772.
- [99] MONNET G. New insights into radiation hardening in face-centered cubic alloys [J]. *Scripta Materialia*, 2015, 100: 24–27.
- [100] GHONIEM N M, SINGH B N, SUN L Z, et al. Interaction and accumulation of glissile defect clusters near dislocations [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, 276(1/2/3): 166–177.
- [101] RODNEY D, MARTIN G, BRÉCHET Y. Irradiation hardening by interstitial loops: atomistic study and micromechanical model [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2001, 309/310: 198–202.

- [102] OSETSKY Y N, STOLLER R E, RODNEY D, et al. Atomic-scale details of dislocation-stacking fault tetrahedra interaction [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2005, 400/401: 370–373.
- [103] PATRA A, MCDOWELL D L. Crystal plasticity investigation of the microstructural factors influencing dislocation channeling in a model irradiated bcc material [J]. *Acta Materialia*, 2016, 110: 364–376.
- [104] CUI Y N, PO G, GHONIEM N. Size-tuned plastic flow localization in irradiated materials at the submicron scale [J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(21): 215501.
- [105] CUI Y N, PO G, GHONIEM N. Suppression of localized plastic flow in irradiated materials [J]. *Scripta Materialia*, 2018, 154: 34–39.

Advances and Application of Dislocation Dynamics in the Mechanics of Extreme Environment

CUI Yinan¹, LIU Zhanli¹, HU Jianqiao², LIU Fengxian¹, ZHUANG Zhuo¹

(1. *Applied Mechanics Laboratory, Department of Engineering Mechanics, School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing, 100086, China;*
2. *State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing, 100190, China*)

Abstract: Discrete dislocation dynamics (DDD) simulation method, as an ideal tool for bridging the gap in space and time scales between atomistic and continuum models, has made great progress in the past few decades. One prominent example is the coupling between DDD and finite element method (FEM), which leads to the capability of DDD to investigate the problems with complicated boundary conditions and multi-physics coupling effect. This work firstly reviewed the development of DDD method, and the coupling algorithm between DDD and FEM. Then, the advances and application of these methods in disclosing the microscopic mechanisms and developing the continuum models are reviewed under the extreme environment of high strain rate, high temperature, and irradiation.

Keywords: discrete dislocation dynamics; high strain rate; high temperature; high pressure; irradiation

高温、高压、高应变速率动态过程晶体塑性有限元理论模型及其应用

刘静楠, 叶常青, 刘桂森, 沈耀

(上海交通大学材料科学与工程学院, 上海 200240)

摘要: 对于高温、高压、高应变速率加载条件下的材料冲击变形行为, 动态晶体塑性模型能够直接反映晶体中塑性滑移的各向异性及其对温度、压力和微观组织结构的依赖性, 因而广泛应用于材料的动态冲击力学响应、微观结构演化以及动态损伤破坏的模拟。本文综述了高压冲击下动态晶体塑性有限元的理论模型, 主要包括变形运动学、包含状态方程的超弹性本构模型和晶体塑性本构模型, 涉及位错滑移、相变、孪生等塑性变形机制, 以及层裂、绝热剪切带等动态破坏方式。

关键词: 动态晶体塑性有限元; 动力学响应; 微观结构演化

中图分类号: O344.1

文献标识码: A

冲击载荷下的材料动力学响应、微观结构演化以及材料损伤与破坏一直是军事、材料科学与工程技术等领域关注的重点。动态冲击试验通常只能测定材料的初始微观结构、变形过程的力学响应以及变形后的宏观性能和部分微观结构, 而无法直接测量冲击下材料微观结构的演化过程以及初始微观结构对材料宏观性能的影响过程。此外, 动态冲击下被广泛使用的 Bodner-Parton(BP)模型^[1]、Johnson-Cook(JC)模型^[2]、Zerilli-Armstrong(ZA)模型^[3]以及 Steinberg-Guinan(SG)^[4]模型等宏观唯象材料本构模型并不包含塑性变形的微观机制, 而只限于拟合实验数据, 只在一定适用范围内描述实验中的应力-应变关系以及应变率效应, 而无法描述冲击试验中的应力松弛^[5]、弹性前驱波衰减^[6]等异常现象。因此, 考虑微观塑性滑移变形机制的动态晶体塑性模型在近年来得到了快速发展, 并展现出对材料动力学响应与微观结构演化的描述能力。

材料在高压、高应变速率下的宏观动力学特性和微观变形机理均与准静态下存在巨大的差异, 适用于冲击加载的动态晶体塑性模型比准静态模型更为复杂, 需考虑更多影响变形的宏观因素与微观机制。宏观因素包括影响变形的静水压强、温度等, 微观机制包括声子拖曳、位错形核等位错行为, 以及相变、孪生等变形模式。动态晶体塑性模型是在准静态模型的基础上建立的, 继承了准静态模型的弹塑性变形框架, 考虑了晶体中塑性滑移的各向异性, 也可以考虑孪生与相变等变形机制, 能够反映变形过程中的微观结构演化。但是, 动态晶体塑性模型通常需要额外考虑材料的非线性弹性响应、大变形引起的显著温升效应以及位错在高速滑移下受到的声子阻碍^[7]等因素, 甚至在冲击载荷下材料可能发生的位错均匀形核^[8-9]等机制。此外, 材料在动态加载下相较于准静态加载更容易发生孪生^[10-12]、相变^[13-16]、断裂损伤^[17-18]等变形机制。Roters等^[19]详述了准静态下晶体塑性模型的理论与应用。郑松林^[20]也对晶体塑性模型在准静态与动态响应中的理论与应用进行了较为详细的介绍。本文侧重于动态冲击加载的晶体塑性模型, 关于准静态的晶体塑性模型理论与应用可参阅 Roters等^[19]和郑松林^[20]的评论。

* 收稿日期: 2019-12-31; 修回日期: 2020-01-17

基金项目: 科学挑战计划(TZ2018001)

作者简介: 刘静楠(1993—), 女, 硕士, 主要从事动态晶体塑性有限元研究. E-mail: jingnanliu@sjtu.edu.cn

通信作者: 沈耀(1972—), 男, 博士, 教授, 主要从事晶体缺陷行为、力学性能及塑性变形的微观机制研究. E-mail: yaoshen@sjtu.edu.cn

本文聚焦于动态冲击加载下的晶体塑性模型,详细综述动态晶体塑性有限元理论框架的运动学、弹性本构和塑性本构等组成部分,以及模型在孪生、相变、断裂损伤等不同变形机制中的扩展。动态晶体塑性理论模型框架的要点主要有冲击加载过程中温度的演化规律、热弹性耦合效应、状态方程在超弹性本构中的引入方法,以及声子拖曳效应对塑性滑移的阻碍作用等。高应变率冲击加载通常会引起材料内部的剧烈温升,因此动态晶体塑性模型在冲击加载下需要考虑温升带来的热弹性耦合效应。由于材料在冲击载荷下的体积变形很大,故通常采用高压状态方程(Equation of state, EOS)来描述材料的非线性弹性容变关系。对于高应变率下的塑性变形过程,材料晶格的声子振动会对位错的高速运动产生强烈的阻碍作用,即声子拖曳,且这种阻碍作用随着位错滑移速度的增加而强化,因此在动态冲击晶体塑性模型中必须引入声子拖曳机制来描述材料的应变率硬化过程。在动态冲击加载下,位错滑移往往不再是材料唯一的塑性变形方式,材料还可能通过相变、孪生、断裂损伤等变形方式释放体系的自由能。因此本文在基于位错滑移的动态晶体塑性模型框架之外还介绍了将相变、孪生、损伤等变形机制引入晶体塑性模型的方法,包括动态相变的驱动力与演化规律、孪晶的演化规律与硬化模型、层裂与绝热剪切带的形成及其对材料本构的影响。

1 变形运动学

在连续介质力学理论中,物质占据空间几何区域所构成的图形,称为物质构型。在变形或刚体运动过程中,物质构型将发生改变。为了对晶体材料的变形过程进行描述,需要建立晶体运动学框架。初始时刻未经变形的晶体材料占据的空间几何图形称为初始构型。采用拉格朗日坐标($\mathbf{X}$)来描述初始构型中任意物质点的位置。晶体材料在变形过程中的瞬时空间几何图形称为现时构型。对于初始构型中位于坐标 $\mathbf{X}$ 的物质点,在现时构型中采用欧拉坐标($\mathbf{x}$)描述其瞬时空间位置。显然,物质点在初始和现时构型之间具有 $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{X}, t)$ 的位置对应关系。描述材料变形程度的基本物理量通常选择变形梯度 $\mathbf{F} = \partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$,其物理含义是现时构型相对于初始构型的梯度张量。物质点的运动速度通常定义在拉格朗日坐标系中 $\mathbf{v}(\mathbf{X}, t) = \partial \mathbf{x}(\mathbf{X}, t) / \partial t$,也可采用欧拉坐标表示为 $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}[\mathbf{X}(\mathbf{x}, t), t]$,通常定义速度梯度 $\mathbf{L} = \partial \mathbf{v} / \partial \mathbf{x}$ 描述物质点速度在现时构型中的梯度。

1.1 弹塑性变形分解

经典的运动学构型如图1所示。晶体材料由初始构型经变形梯度($\mathbf{F}$)变换至现时构型,如图1中的黑色箭头所示。Hill等^[21]、Asaro等^[22]建立中间构型I,将弹性和塑性变形进行乘和分解

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \cdot \mathbf{F}^p \quad (1)$$

式中: $\mathbf{F}^e$ 、 $\mathbf{F}^p$ 分别为弹性和塑性变形梯度。材料由初始构型经塑性变形($\mathbf{F}^p$)变换至中间构型I,再经弹性变形($\mathbf{F}^e$)变换至现时构型,如图1中的红色箭头所示。弹性变形包括刚体旋转和晶格畸变,塑性变形可由位错滑移、相变、孪生等引起。将现时构型中速度梯度张量进行弹、塑性分解

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^e (\mathbf{F}^e)^{-1} + \dot{\mathbf{F}}^e \mathbf{L}_0^p (\mathbf{F}^e)^{-1}, \quad \mathbf{L}_0^p = \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} \quad (2)$$

式中: $\dot{\mathbf{F}}^e$ 、 $\dot{\mathbf{F}}^p$ 分别为弹性和塑性变形梯度的变化率, $\mathbf{L}^e$ 、 $\mathbf{L}^p$ 分别为现时构型中弹性和塑性速度梯度, $\mathbf{L}_0^p$ 为中间构型I中由塑性滑移引起的速度梯度。对于弹性变形部分,若采用对数应变 $\boldsymbol{\varepsilon} = \ln \mathbf{U}^e$ 作为应变度量,一般还需进一步建立中间构型II,采用极分解将弹性变形分解为拉伸和旋转部分

$$\mathbf{F}^e = \mathbf{R}^e \mathbf{U}^e \quad (3)$$

式中: $\mathbf{R}^e$ 为旋转张量, $\mathbf{U}^e$ 为右伸长张量。材料由中间构型I,经弹性拉伸($\mathbf{U}^e$)变换至中间构型II,再经

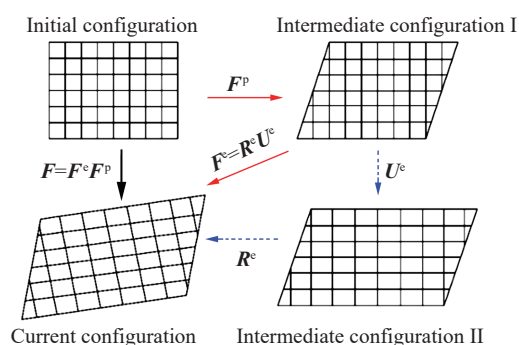


图1 经典的晶体运动学构型

Fig. 1 Classical configurations of crystal kinematics

晶格旋转 (R^e) 变换至现时构型, 如图 1 中的蓝色箭头所示。

1.2 热膨胀构型

材料在动态冲击加载下往往存在显著的温升现象, 而温升引起的热膨胀会导致材料内部应力、应变的变化, 因此如何考虑热膨胀效应的影响是动态晶体塑性模型的一个重要问题。

在晶体塑性模型框架中, 通常有两种考虑热膨胀效应的方法。第 1 种方法是在弹塑性两构型的基础上额外引入热构型, 将热变形与弹性变形解耦。第 2 种方法不额外引入热构型, 而在现有框架下基于热力学自由能进行推导, 在求解超弹性本构过程中考虑热膨胀效应 (详见 2.2.2 节)。本节主要介绍第 1 种引入热构型的方法。Clayton^[23]、Vogler 等^[24]、Hansen 等^[25]、De 等^[26] 以及 Shahba 等^[27] 在构型分解时加入了热构型 F^θ , 如图 2 所示, 将变形梯度分解为塑性变形、热变形以及弹性变形 3 部分

$$F = F^e F^\theta F^p \quad (4)$$

式中: F^e 、 F^θ 、 F^p 分别表示弹性变形梯度、热变形梯度和塑性变形梯度。

相应地, 现时构型中的速度梯度可分解为

$$L = L^e + L^\theta + L^p = L^e + \dot{F}^e L_0^\theta (F^e)^{-1} + \dot{F}^e \dot{F}^\theta L_0^p (F^\theta)^{-1} (F^e)^{-1} \quad (5)$$

式中: L^θ 、 L_0^θ 分别为现时构型和热构型中的热变形速度梯度, $L_0^\theta = \dot{F}^\theta (F^\theta)^{-1}$, $L_0^p = \dot{F}^p (F^p)^{-1}$ 。 L_0^θ 是温度变化率 ($\dot{T}$) 的函数

$$L_0^\theta = \alpha \dot{T} \quad (6)$$

式中: α 为热膨胀系数张量。

2 超弹性本构框架

通常在晶体塑性模型中有超弹性和次弹性两种描述材料弹性行为的本构关系。超弹性本构是指材料存在一个与应变相关的能量函数, 其应力与应变全量之间的关系由能量函数决定, 具有做功独立于加载路径的特点。次弹性本构描述应力率与应变率之间的关系, 由于大变形下弹性模量是随应变全量变化的, 其实际应用比较复杂, 通常只用于小弹性变形情况^[28] (这种情况下弹性模量可视为常数)。考虑到实验中通常采用全量形式的高压固体状态方程描述材料的非线性容变关系, 因此研究材料在冲击载荷下的大弹性变形行为时, 往往采用超弹性本构来描述。

材料在冲击载荷下的超弹性本构关系主要包含基于热力学自由能的超弹性应力表达式以及考虑热弹性耦合效应的温升表达式两方面。其中, 特别需要考虑热膨胀对应力的影响、弹性模量随压强和温度的变化, 以及非线性弹性容变关系 (固体状态方程) 等。

2.1 超弹性本构的热力学框架

超弹性本构通常根据热力学第一、第二定律, 建立热力学势函数所对应的耗散不等式, 得到相应的热力学应力表达式。Becker^[29]、Pi 等^[30]、De 等^[26] 基于内能构建热力学势函数并建立相应的超弹性本构框架, 而更多的研究学者, 如 Clayton^[23]、Vogler 等^[24]、Luscher 等^[31-32]、Santos 等^[33]、Addessio 等^[14] 则基于亥姆霍兹自由能构建相应的热力学势函数。分析表明, 基于内能或亥姆霍兹自由能构建热力学势函数并推导所得的热力学应力表达式是等价的。本节将以形式更简洁的亥姆霍兹自由能为例, 详细介绍

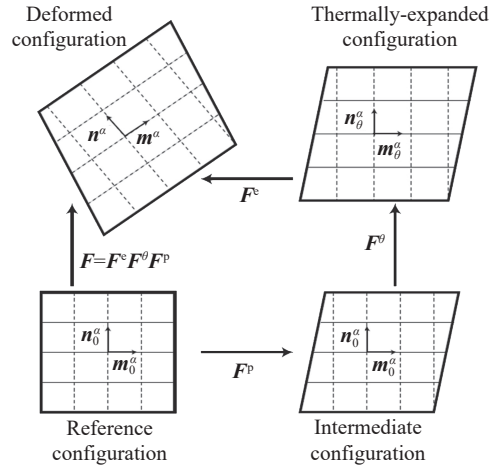


图 2 引入热膨胀构型的变形梯度分解 $F = F^e F^\theta F^p$ ^[19]

Fig. 2 Decomposition of deformation gradient considered thermally-expanded configuration $F = F^e F^\theta F^p$ ^[19]

超弹性本构框架。

根据热力学第二定律,对于任何孤立系统(包括系统 A 与环境 Sur),整体的熵增恒大于或等于零

$$\Delta S = \Delta S_A + \Delta S_{\text{Sur}} \geq 0 \quad (7)$$

式中:无限大环境的熵增与可逆过程的热温熵一致,即 $\Delta S_{\text{Sur}} = -Q/T$ 。式(7)对于系统 A 的任意微小体积单元及其外部环境同样适用,此时系统微小体积单元的热变化 Q 由系统内热源生成的热与从系统外流入的热量两部分构成,熵增定律最终可转化为率形式的 Clausius-Duhem 耗散不等式

$$D_{\text{int}} = \tilde{\rho} T \dot{s} - (\tilde{\rho} R - \text{div} \mathbf{H}) \geq 0 \quad (8)$$

式中: $\tilde{\rho}$ 为参考构型中的材料密度; s 为系统局部的比熵增率; R 表示单位质量的热生成率,产热来自于内部的热源; $\mathbf{H}$ 表示由热传导引起的通过单位面积上的热流矢量; D_{int} 为材料的内禀耗散项,表示材料内部与热源、热传导无关的熵增项。

将能量守恒表达式 $\tilde{\rho} \dot{U} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \tilde{\rho} R - \text{div} \mathbf{H}$ 代入式(8),同时根据亥姆霍兹自由能与内能的关系式 $\psi = U - sT$,耗散不等式最终可用亥姆霍兹自由能表示为

$$D_{\text{int}} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - \tilde{\rho} s \dot{T} - \tilde{\rho} \dot{\psi} \geq 0 \quad (9)$$

单位体积亥姆霍兹自由能(比亥姆霍兹自由能)通常可表示为弹性变形 $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ 、温度 T 以及内状态变量 q_n 的函数 $\psi(\boldsymbol{\varepsilon}^e, T, q_n)$, 其率形式可表示为

$$\dot{\psi}(\boldsymbol{\varepsilon}^e, T, q_n) = \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \frac{\partial \psi}{\partial T} : \dot{T} + \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} \dot{q}_n \quad (10)$$

最终将比亥姆霍兹自由能变化率 $\dot{\psi}$ 的表达式代入耗散不等式(式(9))可得

$$D_{\text{int}} = \left(\boldsymbol{\sigma} - \tilde{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \right) : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e + \tilde{\rho} \left(s + \frac{\partial \psi}{\partial T} \right) \dot{T} + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - \tilde{\rho} \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} \dot{q}_n \geq 0 \quad (11)$$

式中: $\tilde{\rho} \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} \dot{q}_n$ 表示材料中由塑性变形引起的与位错等缺陷相关的微观畸变能的变化率^[26], 在实际计算过程中通常取畸变能变化率为塑性功率的某一比例。如该比例取 10%^[27, 34] 时, 塑性功的 90% 经过耗散转换成热能贡献于升温, 其余 10% 则转换为畸变能存储在位错等微观结构中。

显然,上述耗散不等式对于任意的 $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e$ 与 $\dot{T}$ 均成立, 因此可得到热力学应力与自由能的关系以及内禀耗散项的最终表达式

$$\boldsymbol{\sigma} = \tilde{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} \quad (12)$$

$$D_{\text{int}} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - \tilde{\rho} \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} \dot{q}_n \quad (13)$$

材料在冲击加载下的高压变形往往表现出一定的黏性, 因此在热力学应力之外还需额外考虑材料黏性所产生的变形阻力。黏性反映了物体在体积发生剧烈变化时所受到的阻力与体积变化速度之间的关系。人工黏性最初是由 von Neumann 与 Richtmyer^[35] 为了解决有限差分法在模拟冲击波传播过程中的振荡问题所提出的, 后来被逐渐引入冲击波的流体方程组中, 变成了一个具有物理意义的附加项, 即黏性耗散项^[31], 与压强的量纲相同

$$p_d = f(J) = c_0 c_1 \rho \frac{|J|}{J} + \rho \left(c_2 \frac{J}{J} \right)^2 \quad (14)$$

式中: $J = V/V_0$ 表示体积变形, $\dot{J}$ 表示体积变形率, c_0 是与温度、压强相关的系数, c_1 、 c_2 为常数。

在考虑黏性耗散压的情况下, 总应力由准保守的热力学应力与非保守的耗散应力两部分组成

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}_q + \boldsymbol{\sigma}_d = \tilde{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^e} - p_d \quad (15)$$

2.2 热弹性耦合

热弹性耦合指应力、弹性应变与温度的相互影响, 包含变形引起的温升以及温度对变形及应力的影响。

2.2.1 温 升

温升引起的热效应是冲击加载过程中不可忽视的重要因素。在弹性本构中, 温升引起的热膨胀会导致应力、应变的变化; 在塑性本构中, 温度也是影响位错滑移、相变等塑性变形行为的重要因素。

由经典热力学关系可知, 状态方程中的独立变量仅有两个。温度 T 可表示为比熵与弹性应变的状态函数 $T(s, \epsilon^e)$, 通过泰勒展开可得

$$T = T_{s_0, V_0} + \left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_V \Delta s + \left(\frac{\partial T}{\partial \epsilon^e} \right)_s : \epsilon^e \quad (16)$$

其率形式为

$$\dot{T} = \frac{T}{c_V} \dot{s} - T \boldsymbol{\Gamma} : \dot{\epsilon}^e \quad (17)$$

式中: $\left(\frac{\partial T}{\partial s} \right)_V = \frac{T}{c_V}$, $\left(\frac{\partial T}{\partial \epsilon^e} \right)_s = \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \sigma}{\partial s} \right)_V = -T \boldsymbol{\Gamma}$ 为 Maxwell 关系式, $\boldsymbol{\Gamma} = \frac{1}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial p}{\partial U} \right)_V = \frac{\alpha K_T}{c_V \bar{\rho}}$ 为 Grüneisen 系数, U 为比内能。准静态加载下弹性变形较小, 往往忽略弹性变形引起的等熵温升, 而只考虑温升与熵增之间的热容关系。但是材料在冲击载荷下会发生较大的弹性变形, 弹性变形引起的等熵温升不再可以忽略。

对于历时极短的冲击加载过程, 由于来不及进行热交换, 可将变形材料视为绝热体系, 这时内禀耗散项 $D_{\text{int}} = \bar{\rho} T \dot{s} - (\bar{\rho} R - \text{div} \mathbf{H})$ 在绝热且无热源的情况下退化为 $\bar{\rho} T \dot{s}$ 项。根据 Clausius-Duhem 耗散不等式 (式 (13)), 在考虑黏性耗散作用的情况下, 熵增项 $\bar{\rho} T \dot{s}$ 可表示为

$$\bar{\rho} T \dot{s} = D_{\text{int}} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\epsilon}^p - \bar{\rho} \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} \dot{q}_n + \boldsymbol{\sigma}_d : \dot{\epsilon} \quad (18)$$

将熵增表达式 (式 (18)) 代入式 (17) 可得温度的变化率, 其中温度的变化包括塑性变形、微观畸变、黏性耗散和弹性变形 4 部分的贡献

$$\dot{T} = \frac{1}{\bar{\rho} c_V} \left(\boldsymbol{\sigma} : \dot{\epsilon}^p - \bar{\rho} \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} \dot{q}_n + \boldsymbol{\sigma}_d : \dot{\epsilon} \right) - T \boldsymbol{\Gamma} : \dot{\epsilon}^e \quad (19)$$

2.2.2 热膨胀效应

热膨胀是热弹性耦合的另一方面, 表现为温度变化引起了应力与弹性应变的改变, 即产生了额外的热应变与热应力, 这里的弹性应变为弹塑性构型中的表观弹性应变, 包括温升引起的热膨胀变形和应力引起的纯弹性变形两部分。在晶体塑性模型框架中, 通常有两种等价的考虑温升对变形影响的方法。

第 1 种方法是在弹塑性两构型分解中引入热膨胀构型 (详见 1.2 节)。在此三构型框架下, 求得的弹性应变 ϵ^e 为表观弹性应变与热应变之差 ($\epsilon^e - \alpha \Delta T$), 代表了真实的不包含热膨胀的产生应力的应变部分。第 2 种方法则仍然采用传统的弹塑性两构型分解方法, 不额外引入热膨胀构型。由于热膨胀效应可体现在比熵与应变的偏导关系中, 它对应力的影响可在求解应力表达式 $\boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{\partial \bar{\rho} \psi}{\partial \epsilon^e} \right)_T$ 的过程中推出。

本节以形式更为简洁的第 2 种方法为例, 考虑热膨胀效应推导热力学应力 $\boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{\partial \bar{\rho} \psi}{\partial \epsilon^e} \right)_T$ 的表达式^[31]。系统的比亥姆霍兹自由能 $\bar{\rho} \psi(\epsilon^e, T, q_n)$ 可表示为弹性应变、温度以及内变量 q_n 的函数

$$\bar{\rho} \psi(\epsilon^e, T, q_n) = \bar{\rho} \psi(0, T_0, q_n^0) + \frac{1}{2} \epsilon^e : \mathbf{C} : \epsilon^e - \bar{\rho} \Delta T s + \sum_{n=0}^M \frac{\partial \psi}{\partial q_n} q_n \quad (20)$$

基于上述亥姆霍兹自由能, 热力学应力可根据式 (12) 进行求解。需要注意的是, 热力学应力在求

解过程中需考虑弹性模量随压强的变化以及比熵与应变之间的耦合关系 (即热膨胀效应)

$$\sigma = \left(\frac{\partial \tilde{\rho} \psi}{\partial \epsilon^e} \right)_T = \mathbf{C} : \epsilon^e + \frac{1}{2} \left(\epsilon^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \epsilon^e \right) \frac{\partial p}{\partial \epsilon^e} - \tilde{\rho} \left(\frac{\partial s}{\partial \epsilon^e} \right)_T \Delta T \quad (21)$$

式中: 热弹性耦合体现为 Maxwell 方程中熵增与弹性应变的关系式, 即 $\tilde{\rho} \left(\frac{\partial s}{\partial \epsilon^e} \right)_T = - \left(\frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_V = - \frac{c_V}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial \epsilon^e} \right)_s = c_V \Gamma = \mathbf{C} : \alpha$ (考虑各向异性的 Grüneisen 张量), 最终热力学应力表达式为

$$\sigma = \mathbf{C} : (\epsilon^e - \alpha \Delta T) + \frac{1}{2} \left(\epsilon^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \epsilon^e \right) \frac{\partial p}{\partial \epsilon^e} \quad (22)$$

由式 (22) 可知, 表达式中的 $\epsilon^e - \alpha \Delta T$ 为真实的弹性应变, 是表观弹性应变与热膨胀应变之差。这一结果与引入热构型方法得到的真实弹性应变一致。需要指出的是, 式 (22) 中第 2 项中的 ϵ^e 是表观弹性应变, 而引入热构型的方法中表观弹性应变 ϵ^e 被真实弹性应变 $\epsilon^e - \alpha \Delta T$ 替代, 两者的差别属于高阶小量, 可忽略不计。

2.3 状态方程与球偏量分解

材料的本构关系通常可分为描述体积变化的球量部分 (容变关系) 以及描述形状变化的偏量部分 (畸变关系)。由于材料在冲击载荷下的体积变化很大, 不再满足线弹性关系, 因此通常采用高压状态方程描述材料的非线性弹性容变关系 (压强与比容的关系)。本节将介绍高压冲击下常用的状态方程以及将状态方程引入超弹性本构的方法。

2.3.1 固体状态方程

所谓状态方程, 即物质系统从原有的热力学平衡状态转变为另一热力学平衡状态过程中各个状态参数之间的关系。在固体材料的高压、高温问题的研究中, 常采用压力-温度-比容状态方程作为基本关系式

$$p = p(V, T) \quad (23)$$

式中: p 为压力, V 为比容, T 为温度。基于该方程, 通过热力学关系推导, 可得其他所有状态参量。

在固体状态方程研究中, 一般采用经典的三项式物态方程形式。将固体材料中的能量和压力分解为与温度无关的“冷”贡献部分 (即冷能和冷压), 以及依赖于温度的“热”贡献部分 (即热能和热压), 其中“热”贡献包括晶格热振动贡献和自由电子热振动贡献。因此, 能量和压力可表达为

$$\begin{cases} E = E_C + E_T = E_C + E_{TN} + E_{TE} \\ p = p_C + p_T = p_C + p_{TN} + p_{TE} \end{cases} \quad (24)$$

式中: E_C 为冷能, E_T 为热能, E_{TN} 为晶格热贡献能量, E_{TE} 为电子热贡献能量; p_C 为冷压, p_T 为热压, p_{TN} 为晶格热贡献压力, p_{TE} 为电子热贡献压力。一般情况下, 电子热贡献压力项可忽略, 仅在极高压阶段 (100 TPa 以上) 才需考虑自由电子热振动的影响。下面将具体介绍常用的冷贡献状态方程, 如 Murnaghan 状态方程、Vinet 状态方程, 以及晶格热贡献状态方程, 如 Grüneisen 状态方程、基于 Debye 模型的状态方程。

2.3.1.1 冷能与冷压

(1) Murnaghan 状态方程

Murnaghan 状态方程是描述冷贡献的一个重要方程。当加载过程中冲击压力较低时, 体积模量与压力之间的依赖关系可近似地采用一阶泰勒展开式描述

$$K(p) = -V \frac{dp}{dV} = K_0 + K' p \quad (25)$$

式中: $K(p)$ 为依赖于压力的瞬态体积模量, K_0 、 K' 分别为零压体积模量和体积模量关于压力的导数。通过对式 (25) 中第 2 个等式进行积分, 可得到 Murnaghan 状态方程

$$p_{\text{Mur}} = \frac{K_0}{K'} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{K'} - 1 \right] \quad (26)$$

式中: p_{Mur} 为 Murnaghan 状态方程描述的冷贡献压力, V_0 、 V 分别为零压比容和变形中的瞬态比容。根据弹性体积应变和比容之间的关系 ($V/V_0 = 1 + \varepsilon_v^e$) 以及指数函数幂级数展开式的一阶近似, 可得到 Murnaghan 状态方程的等价形式

$$p_{\text{Mur}} = \frac{K_0}{K'} [\exp(-K' \varepsilon_v^e) - 1] \quad (27)$$

式中: 体积应变 $\varepsilon_v^e = \boldsymbol{\varepsilon}^e : \boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ 为弹性应变张量, $\boldsymbol{I}$ 为二阶单位张量。

对于通常的固体材料, Murnaghan 状态方程适用的压力范围可达到太帕量级。对于更高压力范围的动态研究, 需要采用高阶泰勒展开式代替一阶近似来描述体积模量与压力的关系, 如三阶 Birch-Murnaghan 状态方程

$$p_{\text{B-M}} = \frac{3}{2} K_0 \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} \right] \left\{ 1 + \frac{3}{4} (K' - 4) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right] \right\} \quad (28)$$

能够对极高压力下的压力-比容关系进行更准确的数值描述。

(2) Vinet 状态方程

材料的冷压除了可通过对体积模量的微分形式积分得到之外, 也可通过冷能即晶格结合能对比容的偏导关系获得。例如 Vinet 状态方程^[36] 采用亥姆霍兹自由能来描述固体材料的晶格结合能即冷能

$$\psi_c(V) = \frac{4V_0 K_0}{(K' - 1)^2} [1 - (1 + X) \exp(-X)] \quad (29)$$

$$X = \frac{3}{2} (K' - 1) \left[\left(\frac{V}{V_0} \right)^{1/3} - 1 \right] \quad (30)$$

式中: K_0 和 K' 分别表示零压体积模量以及瞬时体积模量对压强的导数, V_0 、 V 分别为零压比容和变形中的瞬态比容。

根据系统冷压与冷能之间的关系 $p_c = - \left(\frac{\partial \psi_c}{\partial V} \right)_T$, 可得到 Vinet 形式的冷压表达式

$$p_{\text{Vinet}} = -3K_0 \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{1/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \exp(-X) \quad (31)$$

2.3.1.2 热能与热压

(1) Grüneisen 状态方程

Grüneisen 状态方程是描述晶格热贡献的一个重要方程。引入热力学参量 Γ 用于描述等体积条件下压力关于内能的变化率, 称为 Grüneisen 系数。考虑到等体积条件下冷压 $p_c(V)$ 为常数, 可将 Γ 表示为

$$\Gamma = V \left(\frac{\partial p}{\partial E} \right)_V = V \left(\frac{\partial p_T}{\partial E_T} \right)_V \quad (32)$$

假设 Γ 对温度不敏感, 仅为比容 V 的函数, 在比容 V 恒定的情况下对式 (32) 中定义的热压和热能关系式进行积分, 即可得到 Grüneisen 状态方程

$$p_G = \frac{\Gamma}{V} E_T \quad (33)$$

式中: p_G 为 Grüneisen 状态方程描述的晶格热振动贡献压力, 晶格热能 $E_T = \int_{T_0}^T c_v dT$, T_0 为参考温度, c_v 为定容比热容。

关于 Grüneisen 系数的计算, 大致有 3 种方法。传统的方法是基于热力学基本公式, 推导 Grüneisen 系数与热力学参数之间的关系

$$\Gamma = \frac{V\alpha K_T}{c_V} = \frac{V\alpha K_S}{c_p} \quad (34)$$

式中: α 为热膨胀系数, K_T 、 K_S 分别为等温和等熵体积模量, c_V 、 c_p 分别为定容比热容和定压比热容。事实上 Grüneisen 系数并非常数, 会随着材料体积的变化而变化。第 2 种方法基于 Debye 模型描述的微观热振动方法 (Migault 公式), 将 Grüneisen 系数对比容的依赖表示为

$$\Gamma = \left(\frac{a}{2} - \frac{2}{3} \right) - \frac{V}{2} \frac{\partial^2 (p_C V^a) / \partial V^2}{\partial (p_C V^a) / \partial V} \quad (35)$$

式中: a 为常数, 且有 3 种理论公式可选用。当 $a = 0$ 时, 式 (35) 为 Slater 公式; 当 $a = 2/3$ 时, 为 Dugdale-MacDonald (D-M) 公式; 当 $a = 4/3$ 时, 为自由体积公式。然而, 特定变形条件下对 a 的选择令学者们感到困惑。李欣竹^[37] 基于冲击实验结果建立了第 3 种方法: 首先将实验得到的比容、冲击波速和物质点运动速度分别代入冲击波质量守恒方程和能量守恒方程, 得到冲击压力和冲击能量, 再由 Born-Meyer 势得到冷压和冷能, 代入式 (33) 即可得到 Grüneisen 系数, 即 $\Gamma = V(p_H - p_C) / (E_H - E_C)$ 。

(2) 基于 Debye 模型的状态方程

材料的晶格热压除了可直接借助压力与热能之间的关系即 Grüneisen 系数来获得, 也可用热能与比容之间的偏导关系推导得到。Debye 模型是常用的描述晶格振动与热能关系的模型, 该模型把晶格振动的频率看作连续分布的函数, 晶格振动能可表示为

$$\psi_{TN}(V, T) = \frac{R}{M_{\text{mol}}} \left[\frac{9}{8} T_D + 3T \ln(1 - e^{-T_D/T}) - TD(T_D/T) \right] \quad (36)$$

式中: R 、 M_{mol} 分别为摩尔气体常数和摩尔质量, Debye 函数 $D(x) = \left(\frac{1}{x} \right)^3 \int_0^x \frac{z^3}{e^z - 1} dz$, T_D 为 Debye 温度。

根据系统热压与热能之间的关系 $p_T = - \left(\frac{\partial \psi_{TN}}{\partial V} \right)_T$, 可得到基于 Debye 模型的热压表达式

$$p_{\text{Debye}} = \frac{3RT_D}{M_{\text{mol}}} \left[\frac{3}{8} + \frac{\exp(-T_D/T)}{1 - \exp(-T_D/T)} - \frac{1}{\exp(T_D/T) - 1} + \frac{T}{T_D} D(T_D/T) \right] \Gamma(V) \quad (37)$$

式中: $\Gamma(V) = - \frac{\partial \ln T_D}{\partial \ln V}$ 表示与体积相关的 Grüneisen 系数。

此外, Cawkwell 等^[38] 认为, 在分子晶体中, 除了晶格声子振动外, 还存在分子内振动, 且两种振动模式对温度和体积的依赖性有所区别。因此对于分子晶体, 晶格振动能可由两部分 Debye 模型组成, 即 $\psi_{TN} = \psi_{D,1} + \psi_{D,2}$

$$\begin{cases} \psi_{D,1} = 3Q \left[\frac{1}{8} k_B T_{D,1} + k_B TD \left(\frac{T_{D,1}}{T} \right) \right] \\ \psi_{D,2} = 3(3N - Q) \left[\frac{1}{8} k_B T_{D,2} + k_B TD \left(\frac{T_{D,2}}{T} \right) \right] \end{cases} \quad (38)$$

式中: $N = R/k_B M_{\text{mol}}$ 表示单位质量的原子数量, k_B 为玻尔兹曼常数, Q 表示大多数的低频声子数, $3N - Q$ 则为分子内振动的声子数。

2.3.2 球偏量分解

为了将状态方程引入应力表达式中, 需要考虑应变球量和偏量的解耦。可直接解耦的应变张量应满足在等体积变形时对角元素之和 (球量) 为零, 这样可用小变形下相同的方法将球偏量解耦。定义在中间构型 II (见 1.1 节) 上的对数应变 $\boldsymbol{\varepsilon}^e = \ln \mathbf{U}^e$ 满足此要求, 可直接做球偏量分解, 并引入状态方程。但是定义在中间构型 I (见 1.1 节) 上的格林-拉格朗日应变 $\mathbf{E}^e = (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I})/2$ 不满足此要求, 无法直接做球偏量分解。Luscher 等^[31] 指出实际上并不存在与对数应变 $\boldsymbol{\varepsilon}^e$ 完全功共轭的应力张量, 因此本节以严格功共轭的格林-拉格朗日应变 $\mathbf{E}^e$ 和 PK II 应力为例, 详细介绍对 $\mathbf{E}^e$ 球偏量分解的方法以及将状态方程引入应力表达式的过程。

Luscher 等^[31-32, 39] 提出了将与纯体积变形相关的应变部分从格林-拉格朗日应变 $\mathbf{E}^e$ 中解耦的方

法。由于 $\mathbf{E}^e$ 无法直接分解, 先将变形梯度 $\mathbf{F}^e$ 分解为体积变形部分和等体积变形部分

$$\mathbf{F}^e = \widehat{\mathbf{F}}^e \overline{\mathbf{F}}^e \quad (39)$$

式中: $\overline{\mathbf{F}}^e = J^{1/3} \mathbf{I}$ 为体积变形梯度, $\widehat{\mathbf{F}}^e = J^{-1/3} \mathbf{F}^e$ 为等体积变形梯度。

根据格林-拉格朗日应变的一般表达式 $\mathbf{E}^e = (\mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \mathbf{I})/2$, 相应的等体积应变与体积应变分别表示为

$$\widehat{\mathbf{E}}^e = \frac{1}{2} (\widehat{\mathbf{F}}^{eT} \widehat{\mathbf{F}}^e - \mathbf{I}) \quad (40)$$

$$\overline{\mathbf{E}}^e = \frac{1}{2} (\overline{\mathbf{F}}^{eT} \overline{\mathbf{F}}^e - \mathbf{I}) = \frac{1}{2} (J^{2/3} - 1) \mathbf{I} \quad (41)$$

显然 $\mathbf{E}^e \neq \widehat{\mathbf{E}}^e + \overline{\mathbf{E}}^e$, 这是由于等体积应变 $\widehat{\mathbf{E}}^e$ 定义在体积变形构型中, 而格林-拉格朗日应变 $\mathbf{E}^e$ 和体积应变 $\overline{\mathbf{E}}^e$ 均定义在中间构型 I 中。将 $\widehat{\mathbf{E}}^e$ 后拉至中间构型 I 得到

$$\widehat{\widehat{\mathbf{E}}}^e = \overline{\mathbf{F}}^{eT} \widehat{\mathbf{E}}^e \overline{\mathbf{F}}^e = \frac{1}{2} \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e - \frac{1}{2} J^{2/3} \mathbf{I} \quad (42)$$

最终定义在相同构型 (即中间构型 I) 中的等体积应变与体积应变满足

$$\mathbf{E}^e = \widehat{\widehat{\mathbf{E}}}^e + \overline{\mathbf{E}}^e = \widehat{\mathbf{E}}^e + \frac{1}{3} \delta \mathbf{I} \quad (43)$$

式中: $\delta = \frac{3}{2} (J^{2/3} - 1)$ 表示总体积应变。

为了将状态方程引入应力表达式, 需将式 (44) 中仅描述材料体积变化的自由能和应力部分与描述形变的部分解耦出来。式 (44) 可由亥姆霍兹自由能式 (20), 将比熵 s 泰勒展开得到

$$\tilde{\rho} \psi(\mathbf{E}^e, T, q_n) = \frac{1}{2} \mathbf{E}^e : \mathbf{C} : \mathbf{E}^e - \mathbf{E}^e \mathbf{C} : \alpha \Delta T + \tilde{\rho} \psi_{\text{ref}}(T, q_n) \quad (44)$$

式中: 与弹性变形无关的自由能均归纳在 $\tilde{\rho} \psi_{\text{ref}}(T, q_n)$ 项中。将式 (44) 中的应变 $\mathbf{E}^e$ 分解为等体积应变 $\widehat{\mathbf{E}}^e$ 与体积应变 $\overline{\mathbf{E}}^e$, 将热膨胀系数 α 分解为球量与偏量部分 $\alpha = \frac{1}{3} \alpha_v \mathbf{I} + \alpha'$ 。显然, 仅仅由体积膨胀引起的自由能变化描述的是与体积变化相关的自由能部分

$$\tilde{\rho} \psi_v = \frac{1}{2} \overline{\mathbf{E}}^e : \mathbf{C} : \overline{\mathbf{E}}^e - \overline{\mathbf{E}}^e : \mathbf{C} : \frac{1}{3} \alpha_v \Delta T \mathbf{I} = \frac{1}{2} K \delta^2 - K \delta \alpha_v \Delta T \quad (45)$$

式中: K 为体积模量, $K = \frac{1}{9} \mathbf{I} : \mathbf{C} : \mathbf{I}$ 。需要指出的是, 亥姆霍兹自由能关系式 (式 (44)) 中体积应变与等体积应变的耦合项 $\overline{\mathbf{E}}^e : \mathbf{C} : \widehat{\mathbf{E}}^e$ 中虽然包含了体积应变 $\widehat{\mathbf{E}}^e$, 但这部分自由能与描述材料仅在球量变形状态下的压强 (状态方程) 无关。

从这部分自由能可得到与体积变化相关的应力为

$$\mathbf{S}_v = \frac{\partial \tilde{\rho} \psi_v}{\partial \mathbf{E}^e} = K J^{2/3} (\delta - \alpha_v \Delta T) (\mathbf{C}^e)^{-1} + \frac{1}{2} \left(\overline{\mathbf{E}}^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \overline{\mathbf{E}}^e \right) \frac{\partial p}{\partial \mathbf{E}^e} \quad (46)$$

式中: 右柯西-格林变形张量 $\mathbf{C}^e = \mathbf{F}^{eT} \mathbf{F}^e$, 体积变化 J 对格林应变的偏导数 $\partial J / \partial \mathbf{E}^e = -J (\mathbf{C}^e)^{-1}$, 压强对格林应变的偏导数 $\partial p / \partial \mathbf{E}^e = -J K (\mathbf{C}^e)^{-1}$ 。

显然, 这部分描述体积变化的应力与描述压力 p 变化规律的状态方程相关, 可转化为用状态方程 p_{EOS} 表示的更为精确的表达式 $\mathbf{S}_{\text{EOS}}$ 。而其他描述形状变化的应力则可用应力 (式 (22)) 减去式 (46) 得到。最终 PK II 应力 $\mathbf{S} = \mathbf{S}_{\text{EOS}} + \mathbf{S}_{\text{dev}}$ 可表示为

$$\mathbf{S}_{\text{EOS}} = \frac{\partial \tilde{\rho} \psi_v}{\partial \mathbf{E}^e} = \frac{\partial \tilde{\rho} \psi_v}{\partial V} \frac{\partial V}{\partial \mathbf{E}^e} = -J p_{\text{EOS}} (\mathbf{C}^e)^{-1} \quad (47)$$

$$\mathbf{S}_{\text{dev}} = \mathbf{C} : (\mathbf{E}^e - \alpha \Delta T) - K J^{2/3} (\delta - \alpha_v \Delta T) (\mathbf{C}^e)^{-1} + \left[\frac{1}{2} \left(\widehat{\mathbf{E}}^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \widehat{\mathbf{E}}^e \right) - \left(\widehat{\mathbf{E}}^e : \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial p} : \overline{\mathbf{E}}^e \right) \right] \frac{\partial p}{\partial \mathbf{E}^e} \quad (48)$$

式中: 状态方程 $p_{\text{EOS}} = -\frac{\partial \tilde{\rho} \psi_v}{\partial V}$ 包含了冷压与热压两部分, $p_{\text{EOS}} = p_c + p_T$, $\frac{\partial V}{\partial \mathbf{E}^e} = -J (\mathbf{C}^e)^{-1}$ 。

3 动态晶体塑性本构框架

晶体塑性本构框架一般包括流动准则和硬化方程两部分。准静态晶体塑性框架中,流动准则主要有率相关、率无关的流动准则两类;硬化方程通常考虑材料的应变硬化、应变率硬化和热软化效应。动态晶体塑性本构框架中,考虑到高温、高压、高应变速率的动态冲击过程中,固体材料的黏塑性即应变率效应变得尤为显著^[40],一般需要建立率相关的流动准则,并且高速变形过程中的塑性滑移阻力与声子黏性拖曳密切相关,因此动态硬化方程中还应当考虑声子拖曳效应。

动态晶体塑性本构框架可分为唯象的动态晶体塑性框架和基于位错行为的动态晶体塑性框架两类,下面分别对这两类晶体塑性框架进行详细介绍。

3.1 唯象的动态晶体塑性框架

唯象的动态晶体塑性框架包括流动准则和硬化本构方程两部分,它们描述了冲击变形过程中滑移速率、流动应力等材料状态变量的演变规律,其唯象描述与具体物理机制越接近,对材料动态冲击变形的模拟越准确,相应的模型预测能力越强^[27]。本节主要介绍高速冲击加载条件下,唯象的动态晶体塑性有限元研究中建立的流动准则和硬化本构方程。

3.1.1 率相关的流动准则

率相关的流动准则描述了塑性应变速率与滑移系分切应力、塑性滑移阻力以及微观结构相关的其他内变量之间的关系。现有的率相关流动准则主要包括幂形式黏塑性模型和热激活模型等。

3.1.1.1 幂形式黏塑性模型

幂形式的黏塑性流动准则由 Hutchinson^[41] 在研究准静态变形问题时提出,将滑移系 α 上的滑移速率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 表示为滑移系上分切应力和滑移阻力比值的幂函数

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0 \left| \frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right|^{1/m} \operatorname{sgn} \left(\frac{\tau^\alpha}{g^\alpha} \right) \quad (49)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为参考滑移速率, τ^α 为滑移系 α 上的分切应力, g^α 为滑移系 α 上的临界分切应力即滑移阻力, m 为应变率敏感性因子。当应变率敏感因子 $m \rightarrow 0$ 时,即为率无关流动准则。Li 等^[42]、Khan 等^[43] 将幂形式黏塑性模型应用于动态单轴压缩变形模拟, Zhang 等^[44]、Lim 等^[45] 应用于 Taylor 冲击变形的晶体塑性有限元模拟, Bobbili 等^[46] 应用于分离式霍普金森压杆 (SHPB) 试验的动态晶体塑性模拟研究中。

Becker^[29]、De 等^[26] 将幂形式黏塑性流动方程 (式 (49)) 进行转化,成为形式上的率无关流动准则。但是为了考虑材料的应变率效应,他们对滑移阻力进行了率相关的修正,从而建立形式上率无关但本质上率相关的流动方程

$$\begin{cases} \tau^\alpha - \bar{\tau}^\alpha = 0 & \dot{\gamma}^\alpha \neq 0 \\ \tau^\alpha - \bar{\tau}^\alpha < 0 & \dot{\gamma}^\alpha = 0 \\ \tau^\alpha - \bar{\tau}^\alpha > 0 & \text{不存在} \end{cases} \quad (50)$$

式中: $\bar{\tau}^\alpha$ 为最初率无关形式的流动准则中定义的滑移阻力。率相关形式的流动准则中定义的滑移阻力 g^α 与 $\bar{\tau}^\alpha$ 之间的关系为 $\bar{\tau}^\alpha = g^\alpha (\dot{\gamma}^\alpha / \dot{\gamma}_0)^m \operatorname{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha)$, 这样式 (50) 与式 (49) 实际上是等价的。当滑移系上的分切应力小于临界分切应力或滑移阻力时,该滑移系不发生塑性滑移;一旦滑移系上的分切应力达到临界分切应力,则该滑移系启动,随之开始发生塑性滑移。动态冲击变形过程与准静态变形过程相比,塑性滑移速率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 显著增大,参考滑移速率 $\dot{\gamma}_0$ 相应地增大。

3.1.1.2 热激活模型

Kocks 等^[47] 基于 Arrhenius 方程提出热激活流动准则,能够显式地反映塑性滑移热激活过程对温度的依赖。滑移系 α 上的热激活流动准则可以表示为

$$\dot{\gamma}^\alpha = \dot{\gamma}_0^\alpha \exp \left(-\frac{Q^\alpha}{k_B T} \right) \quad (51)$$

式中: Q^α 为滑移系 α 上发生塑性滑移的热激活能, T 为瞬态材料温度。参考塑性滑移速率为 $\dot{\gamma}_0^\alpha$, 成功跨

越势垒 Q^α 使得塑性滑移发生的概率为 $\exp(-Q^\alpha/k_B T)$, 两者的乘积即为滑移系 α 上真实的塑性滑移速率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 。显然, 环境温度或变形引起的温升越大, 热起伏提供的能量越大, 跨越势垒所需的力越小, 如图 3(a) 所示。 $\dot{\gamma}_0^\alpha$ 通常是与加载压力和应变速率相关的常数, 因此跨越势垒的概率越大, 相应的塑性滑移速率越大。

塑性滑移过程的热激活能依赖于局部流动应力和滑移阻力

$$Q^\alpha = Q_0^\alpha \left[1 - \left(\frac{|\tau^\alpha - g_{\text{ath}}^\alpha|}{g^\alpha} \right)^{m_1} \right]^{m_2} \text{sgn}(\tau^\alpha - g_{\text{ath}}^\alpha) \quad (52)$$

式中: Q_0^α 为参考激活能; m_1 、 m_2 是与滑移阻力相关的材料参数; g^α 为滑移系 α 上克服短程势垒的滑移阻力, 对温度和应变率敏感; g_{ath}^α 为滑移系 α 上克服与缺陷相关长程势垒的滑移阻力, 对温度和应变率不敏感, 如图 3(b) 所示。随动态变形过程中材料局部流动应力的增大, 热激活能减小, 跨越势垒的概率增大, 相应的塑性滑移速率增大。Khan 等^[43]、Li 等^[48] 分别将热激活流动准则应用于模拟动态单轴压缩和单轴拉伸变形中, Bronkhorst 等^[49]、Chandra 等^[50] 应用于分离式霍普金森压杆 (SHPB) 试验的动态晶体塑性模拟研究中, Luscher 等^[31]、Addessio 等^[14] 应用于模拟平板撞击试验中的冲击变形行为。

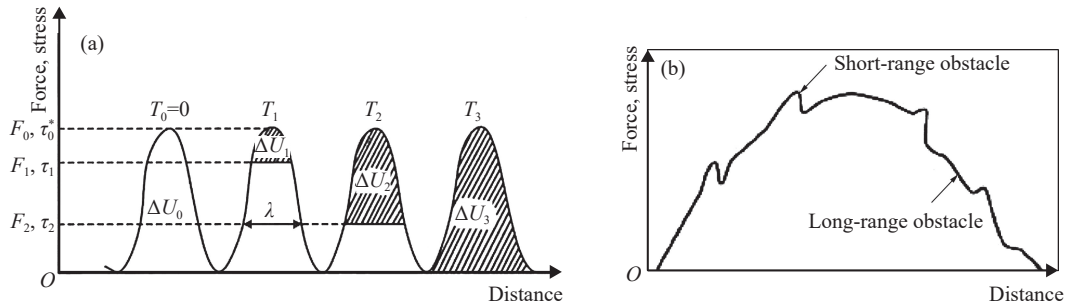


图 3 (a) 热能协助位错克服势垒 ($T_0 < T_1 < T_2 < T_3$)^[51], (b) 位错在运动过程中遇到的势垒^[52]

Fig. 3 (a) Thermal energy assists dislocations to overcome barriers ($T_0 < T_1 < T_2 < T_3$)^[51], and (b) barriers encountered by a dislocation on its course^[52]

3.1.2 硬化方程

建立适用于高温、高压、高应变速率变形条件下材料的硬化模型, 需要考虑的机制包括: 应变硬化效应、应变率硬化效应、声子拖曳效应、热软化效应等。动态晶体塑性框架中, 在每个晶体滑移系上分别建立热黏塑性硬化方程, 其一般形式为 $g^\alpha = f(\dot{\gamma}^\alpha, \dot{\gamma}^\alpha, T)$ 。唯象的动态晶体塑性框架中建立的硬化方程大致可以分为两类: 应变硬化方程和位错密度硬化方程。

3.1.2.1 应变硬化方程

经典的唯象硬化方程考虑材料的应变硬化效应。晶体材料在外加载荷作用下, 当滑移系上的分切应力达到临界分切应力即滑移阻力时, 该滑移系开始发生塑性滑移。随后的变形过程中滑移阻力不断增大, 维持该滑移系继续塑性滑移所需的分切应力相应增大, 称为滑移系的自硬化现象; 由于滑移系之间的交互作用, 该滑移系上发生塑性滑移能够影响其他滑移系硬化的能力, 称为滑移系的潜硬化现象^[53]。基于此, 引入滑移系硬化模量 ($h_{\alpha\beta}$) 来描述滑移阻力随时间的演化

$$\dot{g}^\alpha = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^\beta \quad (53)$$

进一步引入参数 r 和 h_β 建立瞬态硬化模量的表达式^[41]

$$h_{\alpha\beta} = [r + (1-r)\delta_{\alpha\beta}] h_\beta \quad (54)$$

可见, 当 $\beta = \alpha$ 时, $h_{\beta\beta} = h_\beta$ (不求和) 为滑移系自硬化模量; 当 $\beta \neq \alpha$ 时, $h_{\alpha\beta} = r h_\beta$ 为滑移系潜硬化模量。

自硬化模量 (h_β) 的形式有很多。Bittencourt^[54]、Bobbili 等^[46] 将滑移系自硬化模量简化为一个常数, 并假设晶体中不同滑移系的硬化能力相同

$$h_\beta = h_0 \quad (55)$$

式中: h_0 为常数。然而, 考虑真实的材料硬化特征, 学者们更多地采用变化的自硬化模量。Peirce 等^[55]、Li 等^[42]、Khan 等^[43] 引入名义饱和滑移阻力 (g_{sn}), 采用双曲函数型自硬化模量

$$h_\beta = h_0 \operatorname{sech}^2 \left(\frac{h_0 \gamma}{g_{sn} - g_0} \right) \quad (56)$$

式中: g_0 为初始滑移阻力, $\gamma = \int_0^t \sum |\dot{\gamma}^\beta| dt$ 为所有滑移系上的累积塑性滑移量。随着塑性变形的增大, 一方面双曲函数型自硬化模量逐渐减小; 另一方面滑移阻力逐渐增大并且趋于饱和值, 甚至可以略微超过名义饱和滑移阻力 g_{sn} 。Zhang 等^[44]、Chandra 等^[50]、Li 等^[48] 引入实际饱和滑移阻力 (g_s), 采用幂形式的自硬化模量

$$h_\beta = h_0 \left(1 - \frac{g^\beta}{g_s} \right)^a \quad (57)$$

式中: 幂指数 $a < 1$ 。随着塑性变形的增大, 滑移阻力逐渐增大, 相应的自硬化模量逐渐减小; 当滑移阻力达到饱和值之后不再改变, 此后的自硬化模量始终为零。考虑到不同滑移系上的饱和滑移阻力未必相同, Acharya 等^[56]、Bronkhorst 等^[49]、Luscher 等^[31]、Addessio 等^[14] 引入滑移系上的饱和滑移阻力 (g_s^β)。滑移系 β 上的自硬化模量 $h_\beta = f(g^\beta)$ 在 $g^\beta \in [g_0, g_s^\beta]$ 区间内有定义, 并且区间端点值为 $h_\beta|_{g^\beta=g_0} = h_0$, $h_\beta|_{g^\beta=g_s^\beta} = 0$, 他们采用线性插值函数

$$h_\beta = h_0 \left(\frac{g_s^\beta - g^\beta}{g_s^\beta - g_0} \right)^{k_b T/Q}, \quad g_s^\beta = g_{s0} \left| \frac{\dot{\gamma}^\beta}{\dot{\gamma}_0} \right|^{k_b T/Q} \quad (58)$$

式中: g_{s0} 为滑移系 β 上的参考滑移阻力, k_b 为玻尔兹曼常数, Q 为参考激活能。随着塑性滑移速率的增大, 滑移系上的饱和滑移阻力相应地增大, 这也体现了应变率硬化效应。此外, Khan 等^[43] 考虑晶粒尺寸效应, 对经典的唯象硬化方程进行改进, 将滑移系自硬化模量表示为晶粒尺寸、滑移量和滑移速率的函数

$$h_\beta = \frac{d}{d\gamma} \left\{ \left[(A + kd^{-n_0}) + B \left(1 - \frac{\ln \dot{\gamma}}{\ln \dot{\gamma}_0} \right)^{n_1} \gamma^{n_2} \right] \right\} \quad (59)$$

式中: d 为平均晶粒尺寸, A 、 k 、 n_0 为 Hall-Petch 系数, B 、 n_1 、 n_2 为应变率硬化和应变硬化相关的材料参数。

动态冲击变形过程中有显著的温升, 这是不同于准静态变形的重要特点之一, 所以动态晶体塑性硬化模型中需要考虑温升引起的热软化。将热软化机制引入唯象的动态晶体塑性框架的思路是, 在温度无关的硬化方程的基础上, 对变形过程中的滑移阻力进行温度相关的修正。基于式 (53) 定义的塑性滑移阻力 g^β , Clayton^[23, 57-58]、Vogler 等^[24] 建立了温度相关的塑性滑移阻力 $g^\beta(T)$ 与变形温度之间的幂形式关系

$$g^\beta(T) = g^\beta \left(\frac{T}{T_r} \right)^{-C} \quad (60)$$

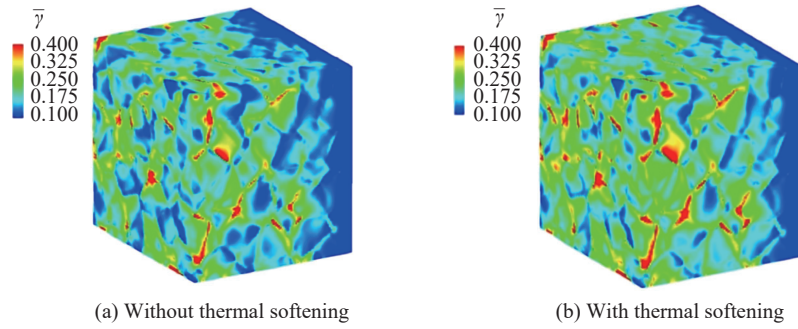
式中: T 、 T_r 分别为瞬时温度和参考温度, C 为热软化指数。由于动态冲击过程中的剧烈温升可能使变形温度接近材料熔点, Tajalli 等^[59]、Khan 等^[43]、Li 等^[60-61] 引入材料熔点参量, 对热软化机制起作用的温度范围规定了上限, 将滑移系自硬化模量表示为

$$g^\beta(T) = g^\beta \left(\frac{T_m - T}{T_m - T_r} \right)^C \quad (61)$$

式中: T_m 为材料熔点。Becker^[29] 基于 Steinberg-Guinan 硬化模型和 Arrhenius 形式的热软化模型, 将滑移系 α 上的滑移阻力表示为

$$g^\alpha(T) = \frac{\mu}{\mu_0} \tau_0 [1 + B(\gamma + \gamma_0)^n] \exp(-\lambda \Delta E_T) \quad (62)$$

式中: μ_0 、 μ 分别为零压和瞬态的材料剪切模量, B 、 n 为应变硬化参数, γ 为所有滑移系上的累积滑移量, γ_0 为初始塑性滑移量 (通常为零), λ 为热软化修正系数, ΔE_T 为比热能变化, τ_0 为参考屈服应力。他们评估了热软化效应对多晶 Ta 斜波加载冲击变形的影响, 如图 4^[29] 所示。结果表明, 基于依赖于温度的材料本构计算得到的塑性应变有所提高, 并且该现象在晶界处更为显著。

图 4 热软化效应对多晶 Ta 在 32 GPa 冲击变形下累积塑性滑移量的影响^[29]Fig. 4 Influence of thermal softening on accumulated plastic slip of polycrystalline Ta during shock deformation under 32 GPa^[29]

在极高变形速率下 (大于 10^4 s^{-1}), 塑性滑移阻力与声子黏性拖曳密切相关, 针对动态冲击问题进行模拟时要求在唯象的硬化模型中引入声子拖曳机制。在 Becker 发展的动态晶体塑性硬化模型的基础上, De 等^[26]考虑声子拖曳效应, 建立滑移系 α 上的滑移阻力方程

$$\bar{\tau}^\alpha = [g^\alpha(T)]_{\text{Becker}} \left(\frac{|\dot{\gamma}^\alpha| + \dot{\gamma}_{\text{off}}}{\dot{\gamma}_0} \right)^m \text{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha) + \frac{\mu}{\mu_0} \tau_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{\theta}{\tau_r} \dot{\gamma}^\alpha\right) \right] \quad (63)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为参考滑移速率, $\dot{\gamma}_{\text{off}}$ 为滑移系率硬化修正参数, τ_0 、 τ_r 分别为常温和瞬态参考屈服应力, θ 为线性声子拖曳系数。他们在 Becker 模型的基础上, 一方面对滑移阻力进行了率相关的修正, 同时考虑了应变硬化效应、应变率硬化效应和热软化效应对滑移阻力的贡献, 即式 (63) 中的第 1 项; 另一方面引入了声子拖曳效应对滑移阻力的贡献, 即式 (63) 中的第 2 项。需要指出的是, 他们建立的流动方程和晶体塑性本构均难以简单地写出滑移系上的塑性应变率 ($\dot{\gamma}^\alpha$) 和滑移阻力 (g^α) 的显式方程。他们通过对 α -RDX 单晶的平板撞击过程进行模拟, 发现未考虑声子拖曳效应的晶体塑性模型对极高应变速率下的滑移临界分切应力预测过低, 如图 5^[26] 所示。

3.1.2.2 位错密度硬化方程

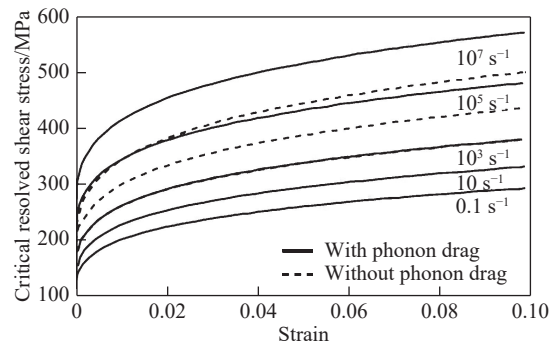
基于位错密度建立硬化模型, 相比于传统的唯象应变硬化模型更准确, 并且物理意义更明确。Khan 等^[43]、Lim 等^[45]将滑移阻力表达为位错密度的函数

$$g^\alpha = \tau_0 + \mu b \left(\sum_{\beta} H_{\alpha\beta} \rho^\beta \right)^{1/2} \quad (64)$$

式中: τ_0 为参考屈服应力, μ 为剪切模量, b 为柏氏矢量, $H_{\alpha\beta}$ 为硬化矩阵, ρ^β 为滑移系 β 上的位错密度。考虑位错密度的增殖和湮灭机制, 将位错密度变化率表示为瞬态位错密度和塑性滑移速率的函数, 建立唯象的位错密度演化方程

$$\dot{\rho}^\alpha = \left[k_1 \left(\sum_{\beta} A_{\alpha\beta} \rho^\beta \right)^{1/2} - k_2 \rho^\alpha \right] |\dot{\gamma}^\alpha| \quad (65)$$

式中: k_1 、 k_2 分别为位错增殖和湮灭项系数, $A_{\alpha\beta}$ 为位错增殖相互作用的张量分量, $\dot{\gamma}^\alpha$ 为滑移系 α 上的塑

图 5 α -RDX 单晶沿 $\langle 210 \rangle$ 晶向平板撞击变形过程中声子拖曳对 (021) $\langle 100 \rangle$ 滑移系上滑移阻力的影响^[26]Fig. 5 Influence of phonon drag on slip resistance of (021) $\langle 100 \rangle$ slip system, during α -RDX single crystal deformed in plate impact along $\langle 210 \rangle$ direction^[26]

性滑移速率。该模型实质上是以位错密度为中间变量的应变硬化模型, 3.2.2 节中将进一步考虑位错的增殖、形核、缠结与湮灭等机制, 建立更加完善的位错密度演化方程。

3.2 基于位错行为的动态晶体塑性框架

唯象的晶体塑性本构通常存在适用范围的局限性, 只能在一定应变率区间内描述材料的塑性变形规律。因此为了满足不同应变率的加载条件, 并同时描述各微观结构的演化, 通常采用 Orowan 方程作为流动法则的模型框架

$$\dot{\gamma}^{\alpha} = \rho_m^{\alpha} b^{\alpha} v^{\alpha} \operatorname{sgn}(\tau^{\alpha}) \quad (66)$$

式中: ρ_m^{α} 表示可动位错密度, v^{α} 表示平均位错运动速度。

Orowan 方程模型框架主要包含可动位错密度的演化以及平均位错速度与各内变量之间的关系两部分内容。可动位错密度演化部分需要考虑位错的形核、增殖、缠结、湮灭等微观过程。位错平均滑移速度部分可由位错滑移障碍物之间的平均距离除以在障碍物之间运动的平均时间得到。而位错在障碍物之间的平均运动时间可分成跨越障碍物的等待时间以及在障碍物之间的滑移时间两部分, 位错的两个运动过程可分别由 Arrhenius 热激活机制和黏性拖曳机制描述。

3.2.1 位错滑移速度

位错速度模型描述了位错滑移速度与滑移系分切应力以及位错滑移阻力之间的关系, 主要可分为 3 类: (1) 简单指数模型, 即基于实验中观察到的单根位错的运动规律, 建立位错速度与分切应力的简单指数关系; (2) 单一机制模型, 即聚焦于位错在低应力区间内或高应力区间内的滑移规律, 只采用单一的热激活模型或线性拖曳模型; (3) 统一模型, 即将位错的滑移过程分为跨越障碍物的等待过程以及在障碍物之间的滑移过程, 统一了位错在不同应力区间内的滑移规律。

第 1 类模型是基于单根位错实验结果的简单拟合, 只描述了位错运动速度与应力之间的关系, 不仅忽略了位错网络对滑移的阻碍作用, 也没有考虑温度对滑移的影响。第 2 类模型只描述位错在某一应力区间与温度范围内的单一规律, 适用范围较窄, 缺乏对位错完整滑移过程的描述。第 3 类模型描述了位错滑移的整个物理过程, 适用于不同的应力区间和温度范围。本节将简单介绍前两类模型, 重点介绍适用范围最广的第 3 类模型。

(1) 简单指数模型

Johnston 与 Gilman^[62] 利用蚀坑法测量了 LiF 单晶中单根螺位错与刃位错在不同应力下的位错速度, 根据位错运动速度与应力关系的实验结果得到以下结论: 其一, 刃位错的滑移速度比螺位错更快, 但两者的差距在接近声速时逐渐消失; 其二, 位错运动的最高速度不能超过声速; 其三, 存在一个位错开始滑移的最低临界应力; 其四, 在低温低应力下, 位错速度与温度近似满足负指数关系。这些结论已被证实其他材料中同样适用。

基于上述实验结果, Gilman^[63] 提出了一种简单的位错速度与应力关系的指数模型

$$v = v^* \exp(-D/\tau) \quad (67)$$

式中: D 为特征阻力; v^* 为位错运动的极限速度, 通常取材料的声速 (剪切波速)。

上述简单的指数模型满足实验上位错速度的边界条件: 当 $\tau \rightarrow 0$ 时, $v \rightarrow 0$; 当 $\tau \rightarrow \infty$ 时, $v \rightarrow v^*$ 。但该模型不仅缺乏对位错运动机制的解释, 也没有反映出位错在低应力区间的转变特征。

为了将模型应用于更广的应力区间, Gilman^[64] 提出了在单指数模型的基础上添加一项在低应力区间内的位错速度

$$v = v_s^* \left[1 - \exp\left(-\frac{\tau}{S}\right) \right] + v_D^* \exp\left(-\frac{D}{\tau}\right) \quad (68)$$

式中: v_s^* 表示低应力下的位错参考速度, S 为低应力下的阻力, v_D^* 表示高应力下的位错参考速度。此改进模型更好地解释了位错运动速度在不同应力区间下的转变现象。

此外, Johnson 与 Barker^[65] 相继提出了关于位错运动速度的指数模型, 但这些模型均只是根据位错

的运动趋势提出的唯象模型, 缺乏相应的物理机制, 且适用范围较窄。

(2) 单一机制模型

单一机制模型包括只适用于低应力区间内的热激活机制以及只适用于高应力区间的线性拖曳机制。Alankar 等^[66]、Zhang 等^[67]、Monnet 等^[68] 采用热激活机制来描述位错在低应力区间内的滑移速度

$$v^\alpha = \lambda v_d \exp \left\{ \frac{\Delta G_0}{k_B T} \left[1 - \left(\frac{|\tau^\alpha|}{g^\alpha} \right)^p \right]^q \right\} \quad (69)$$

式中: λ 为障碍物之间的平均距离, v_d 为 Debye 频率, ΔG_0 为参考激活能。此外, Hansen 等^[25]、Nguyen 等^[69]、Grilli 等^[70] 均采用线性拖曳模型来描述位错的滑移速度

$$v^\alpha = \frac{\tau^\alpha b}{B} \quad (70)$$

式中: B 为拖曳系数。

单一机制模型描述了位错在某一应力区间内的滑移规律, 适用于模拟材料在特定加载区间内的变形过程。但实际上材料在不同时间或空间尺度上的应变率往往存在很大差距, 单一机制模型难以描述这种复杂的变形过程。

(3) 统一物理模型

目前使用最为广泛的模型基于 Frost 与 Ashby^[71] 首先提出的平均位错滑移速度模型框架。该框架将位错在障碍物之间的平均运动时间分成了跨越障碍物的等待时间以及在障碍物之间的滑移时间两部分, 可分别采用热激活模型与声子拖曳模型来描述

$$v^\alpha = \frac{\lambda^\alpha}{t_w^\alpha + t_r^\alpha} \quad (71)$$

式中: λ^α 表示位错滑移过程中障碍物的平均距离, t_w^α 为热激活过程主导的位错脱钉所需要的等待时间, t_r^α 为声子拖曳主导的位错在障碍物之间黏性滑移所需要的时间。

对于滑移较为困难的体心立方 (bcc) 晶体材料, Shahba 等^[27]、Lim 等^[72] 采用螺位错滑移的 Kink-Pair 机制描述上述位错模型的两个滑移过程。Kink-Pair 滑移机制可分为两个阶段, 如图 6^[27] 所示。在第 1 阶段, 位错在障碍物 (Peierls 能垒) 前有一段等待时间, 直到成功通过热激活方式跨越障碍物。在第 2 阶段, 位错分离成一对扭折并以黏性滑移的方式运动到下一个障碍物。对于面心立方 (fcc) 等晶体材料, 也可根据与林位错的交互机制将位错滑移分为类似的等待过程与滑移过程两部分。

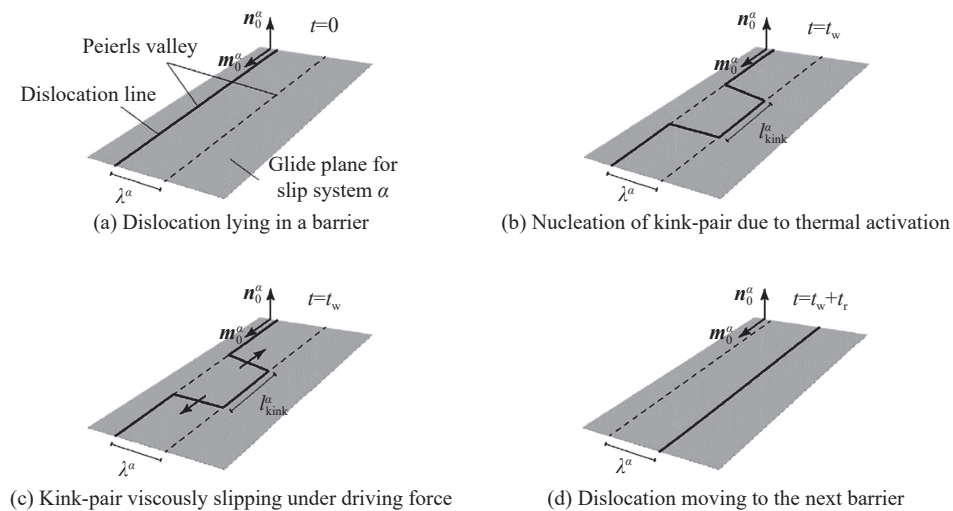


图 6 螺位错滑移的 Kink-pair 机制^[27]

Fig. 6 Illustration of screw dislocation motion via a Kink-pair mechanism^[27]

位错在障碍物前的等待时间 t_w^α 可用 Arrhenius 方程形式的热激活模型^[71]描述

$$t_w^\alpha = \frac{1}{\nu_d} \left\{ \exp \left[\frac{\Delta G(\tau^\alpha)}{k_B T} \right] - 1 \right\} \quad (72)$$

式中: ν_d 为尝试频率, $\Delta G(\tau)$ 是与分切应力相关的激活能。 $\Delta G(\tau)$ 可表述为

$$\Delta G(\tau^\alpha) = \Delta G_0 \left(1 - \left(|\tau^\alpha - g_{\text{ath}}^\alpha| / g^\alpha \right)^{m_1} \right)^{m_2} \quad (73)$$

式中: 阶跃函数 $\langle x \rangle = (|x| + x)/2$; 参考激活能 $\Delta G_0 = g_0 \mu b^3$, g_0 为材料的能垒系数; 滑移阻力 g^α 可采用简单的硬化方程式 (64) 表示。

热激活过程的等待时间以及激活能存在各种不同的表达形式, 但这些表达式均表现为等待时间与温度和分切应力满足负相关的关系。

位错在障碍物之间的滑移时间 t_r^α 取决于位错的黏性滑移速度 ($t_r^\alpha = \ell / v_r^\alpha$), 而位错的黏性滑移过程则受声子拖曳效应的影响。声子拖曳效应指位错在高速运动时, 位错与声子之间发生的散射作用^[63, 73], 位错滑移速率越大, 声子对位错滑移的阻碍作用越强。此外, 位错在高速运动下也受到其他阻碍作用, 例如位错核的辐射作用^[74]。

位错的平均黏性滑移速度通常采用准线性拖曳关系^[39, 75-76]描述

$$v_r^\alpha = \frac{(|\tau^\alpha| - g_{\text{ath}}^\alpha) b^\alpha}{B(v, T)} \quad (74)$$

式中: $B(v, T)$ 是与位错速度和温度相关的黏性拖曳系数, g_{ath}^α 为无热的长程阻力。

Austin 等^[75]为了体现位错速度不能超过声速的物理限制, 提出了耦合相对论效应的拖曳系数表达式

$$B(v, T) = \frac{B_0(T)}{1 - (v/v_s)^2} \quad (75)$$

式中: $B_0(T) = k_B T / \nu_s (b^\alpha)^2$ 是与温度线性相关的初始拖曳系数, ν 表示位错平均速度, ν_s 为材料的剪切波声速。

位错的滑移速度在不同应力区间内的主导因素不同。对于低应变率加载, 位错的运动由热激活过程主导, 位错在障碍物之间的黏性滑移时间相对于热激活时间可忽略不计。对于高应变率加载, 位错的运动由黏性拖曳过程主导, 位错在障碍物前等待的热激活时间相对于黏性滑移时间可忽略不计。通过比较不同应力状态下平均位错运动速度 ν 与热激活速度 $\nu_w^\alpha = \ell / t_w^\alpha$ 、拖曳速度 ν_r^α 之间的关系, 可得到两种主导机制的转变过程, 如图 7^[27] 所示。

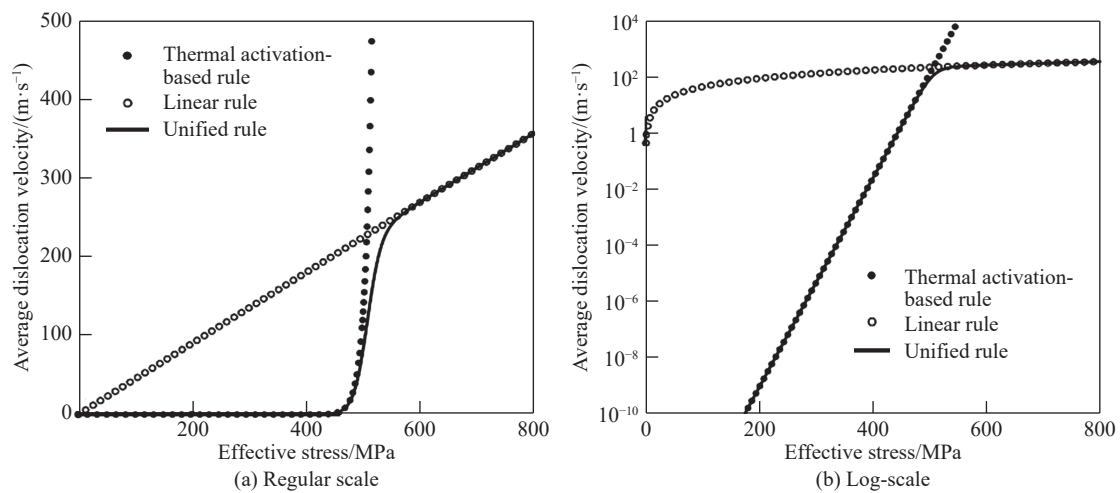


图 7 位错平均运动与热激活运动以及拖曳运动的对比^[27]

Fig. 7 Comparison of the average dislocation velocity with the velocities of thermally-activated and drag-dominated dislocation motions^[27]

3.2.2 位错密度演化

位错密度对塑性滑移的影响主要有两方面: 一方面, 位错滑移受到的平均阻力取决于总的位错密度; 另一方面, 塑性变形只来源于可动位错密度的贡献。所以通常将总位错密度分为可动位错和不可动位错两部分。材料在准静态下的可动位错密度相对于不可动位错来说很少, 并且可近似为常数, 在计算塑性滑移速率时可以忽略可动位错密度的演化。因此, 在唯象的晶体塑性框架中通常不区分材料中的可动位错和不可动位错^[77], 在分析滑移速率演化时仅考虑位错滑移速度的变化, 而分析材料强度变化时仅关注总位错密度的演化。但是 Wang 等^[78]指出高应变率下材料中的可动位错密度是总位错密度的主要部分, 这是由可动位错密度在高应变率下迅速增殖导致的。

材料中可动位错密度 ρ_m 与不可动位错密度 ρ_i 的演化过程主要与位错的形核、增殖、缠结以及湮灭等局部微观机制相关

$$\dot{\rho}_m^\alpha = \dot{\rho}_{nuc}^\alpha + \dot{\rho}_{mult}^\alpha - \dot{\rho}_{trap}^\alpha - \dot{\rho}_{ann}^\alpha \quad (76)$$

$$\dot{\rho}_i^\alpha = \dot{\rho}_{trap}^\alpha \quad (77)$$

式中: $\dot{\rho}_{nuc}^\alpha$ 、 $\dot{\rho}_{mult}^\alpha$ 、 $\dot{\rho}_{trap}^\alpha$ 、 $\dot{\rho}_{ann}^\alpha$ 分别为位错的形核速率、增殖速率、缠结速率和湮灭速率。位错的形核过程 $\dot{\rho}_{nuc}^\alpha$ 包括均匀形核过程 $\dot{\rho}_{hom}^\alpha$ 和非均匀性形核过程 $\dot{\rho}_{het}^\alpha$ 。均匀形核指位错环等缺陷在基体中无择优地均匀成核, 通常只在极高的应变率下并且分切应力接近晶格的理论剪切强度下才可能发生, 此时高应力状态下位错形核的激活能显著地降低。Tschopp 等^[79]、Cawkwell 等^[8]、Shehadeh 等^[80] 均在冲击加载下的分子动力学 (MD) 模拟中观察到了位错的均匀形核现象, 其中位错均匀形核速率的热激活模型为

$$\dot{\rho}_{hom}^\alpha = N\nu_d \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau^\alpha, T)}{k_B T}\right] \quad (78)$$

式中: N 表示单位体积内形核点的平均数量, ν_d 为特征尝试频率 (Debye 频率), ΔG 是与分切应力以及温度相关的位错环形核的自由能。

非均匀形核则指在晶界、第二相界面以及裂纹等应力集中处发生的位错形核现象, 非均匀形核所需要的应力远小于晶格的理论剪切强度。Gupta 最初在模拟 LiF 单晶的冲击响应中引入了非均匀形核模型, 非均匀形核过程通常与基体中的应力集中现象有关。Austin 等^[75] 在 Gupta 模型的基础上提出了适用性更广的非均匀形核模型

$$\dot{\rho}_{het}^\alpha = \alpha_{het} |\dot{\tau}^\alpha| (m+1) \frac{(|\tau^\alpha| - \tau_{min})^m}{(\tau_{max} - \tau_{min})^m} \quad (79)$$

式中: α_{het} 为单位体积内位错源形核的平均长度, $|\dot{\tau}^\alpha|$ 为应力率的绝对值, m 是用于描述位错源形核的临界应力分布的参数, τ_{max} 和 τ_{min} 分别为发生非均匀形核的临界最大应力和最小应力。此外, 也有模型将位错的非均匀形核过程考虑在位错的增殖过程 $\dot{\rho}_{mult}^\alpha$ 中。

位错的增殖机制包括弗兰克-里德源增殖机制、双交滑移增殖机制以及攀移增殖机制等。其中弗兰克-里德位错源增殖机制指位错在与障碍物交互过程中通过外加应力或者高速运动下的惯性效应所形成位错环及其扩展的过程。双交滑移机制指螺位错经过双交滑移后形成了刃型割阶, 并对原位错产生钉扎作用, 成为一个新的弗兰克-里德源。攀移增殖机制通常指刃位错在攀移后形成了 super-jog, 并成为两个单臂弗兰克-里德源。这些增殖机制可统一抽象为位错与林位错之间的交互作用^[81-82]

$$\dot{\rho}_{mult}^\alpha = C_m \sqrt{\rho_{for}^\alpha} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (80)$$

式中: C_m 为与各种增殖机制相关的增殖系数, ρ_{for}^α 为与滑移系 α 发生交互作用的林位错密度。

$$\rho_{for}^\alpha = \sum_{\beta} A_{for}^{\alpha\beta} \rho^\beta \quad (81)$$

式中: 交互矩阵 $A_{for}^{\alpha\beta} = (\mathbf{n}^\alpha \cdot \mathbf{s}^\beta + \mathbf{n}^\beta \cdot \mathbf{q}^\alpha)/2$ 在基于刃位错与螺位错数量相等的假设下可用滑移系的滑移方向 $\mathbf{s}^\alpha$ 与滑移面法向 $\mathbf{n}^\alpha$ 表示, $\mathbf{q}^\beta = \mathbf{n}^\beta \times \mathbf{s}^\beta$ 表示刃位错线的方向, $\mathbf{s}^\beta$ 表示螺位错线的方向。

位错的缠结过程代表了可动位错与林位错作用被缠结并转化为不可动位错的过程

$$\dot{\rho}_{\text{trap}}^{\alpha} = \dot{\rho}_i^{\alpha} = C_T \sqrt{\rho_{\text{for}}^{\alpha}} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (82)$$

式中: C_T 为缠结系数。

位错的湮灭指符号相反的位错在一定捕获距离内相遇所发生的消亡现象, 决定了位错饱和密度的存在。Luscher 等^[39]、Alankar 等^[66] 根据上述湮灭过程建立了简单的湮灭模型

$$\dot{\rho}_{\text{ann}}^{\alpha} = C_A d_a \rho^{\alpha} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \quad (83)$$

式中: C_A 为湮灭系数, d_a 为捕获距离。

为了分析冲击加载下位错各演化机制在不同压力下的主导地位转变, Lloyd 等^[83] 模拟了 5~20 GPa 加载下位错各个演化机制的占比情况, 如图 8^[83] 所示。在中低压 (5~15 GPa) 下, 位错的增殖主要依赖于非均匀形核过程 $\dot{\rho}_{\text{het}}^{\alpha}$ 与增殖过程 $\dot{\rho}_{\text{mult}}^{\alpha}$; 当压力大到一定程度 (大于 20 GPa) 时, 材料发生剧烈的均匀形核过程, 成为位错密度演化的主导因素。

实际上除了可动位错和不可动位错之外, 位错密度还有许多其他区分方式。例如, Alankar 等^[66, 84] 为了体现刃位错和螺位错滑移速率的差异, 将位错密度分为螺位错 ρ_s 和刃位错 ρ_e , 并解释了基面取向的单晶 Ti 的硬化率转变现象。此外, Keshavarz 等^[85]、Liang 等^[86] 为了考虑几何必须位错引起的晶界效应, 将位错区分为统计存储位错 ρ_{ssd} 和几何必须位错 ρ_{GND} , 分析了在 Al 双晶、Ni 基合金等材料中晶界对材料的硬化作用, 并与实验结果较好地吻合。

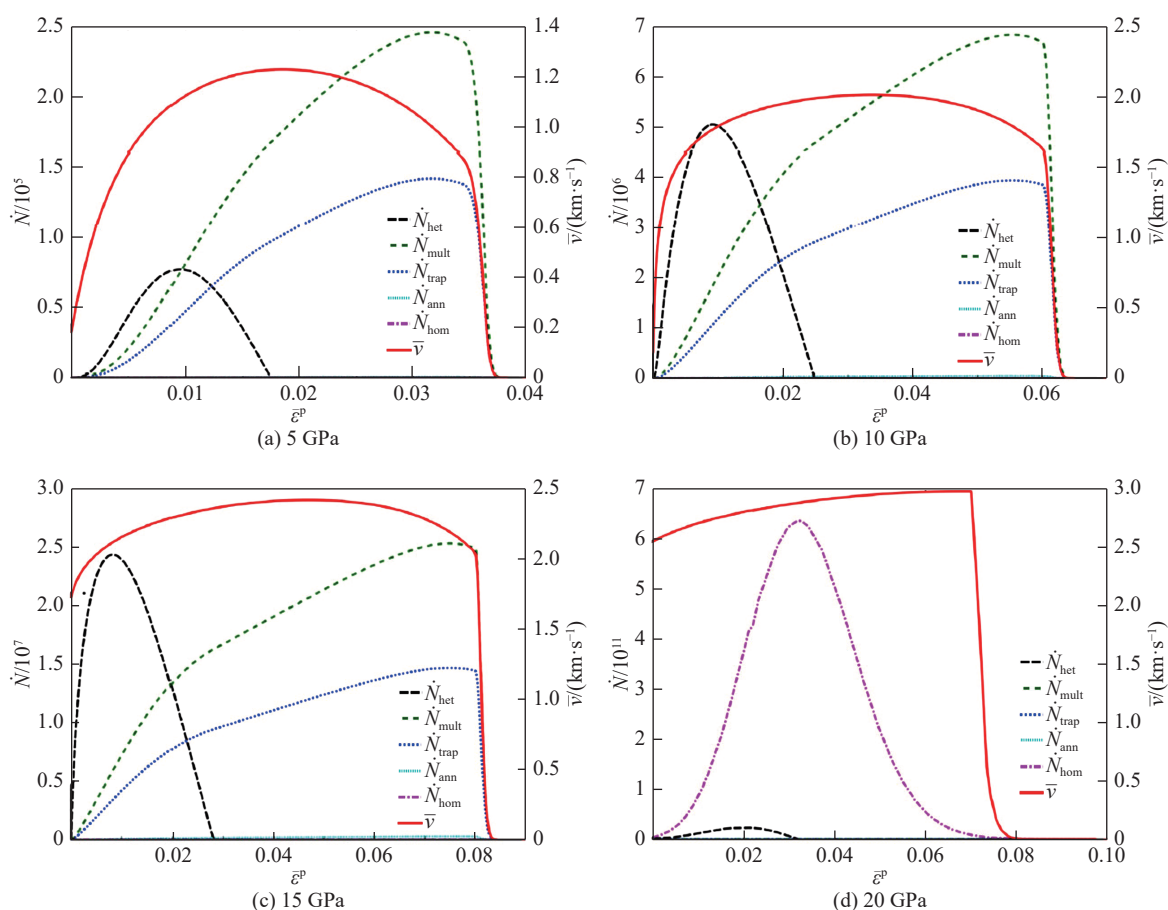


图 8 不同压力加载下位错密度的演化机制^[83]

Fig. 8 Dislocation density evolution mechanisms under different loading pressure^[83]

4 动态相变

在高温、高压、高应变率动态冲击条件下, 位错滑移往往不再是材料唯一的塑性变形方式, 例如

Fe、Ti 和 RDX 等晶体材料也可通过相变与孪晶等方式实现变形。固体相变按原子的迁移方式可分为扩散型相变和位移型(切变)相变。而在高应变率动态变形下,材料发生的往往是切变型马氏体相变,整个相变过程无原子扩散,通过原子协同进行短距离迁移,并以切变的形式完成相变。本节重点介绍如何将马氏体相变机制引入晶体塑性有限元框架,以及在动态冲击与静态加载下相变驱动力与演化准则的差异。

当然除了在晶体塑性有限元框架中直接引入马氏体相变机制之外,也可采用相场与动态晶体塑性有限元结合的方法来模拟变形过程中的相变过程。不同于晶体塑性框架中的局部相变模型,相场法在自由能的基础上考虑了相变量在空间的分布及其所引起的梯度能。相场与动态晶体塑性模型相结合的方法已被广泛应用于模拟准静态下材料的相变、孪生与再结晶等变形过程^[87-91],该方法有望发展至模拟动态冲击下的相变、孪生等塑性变形过程。

4.1 马氏体相变运动学

关于马氏体相变介观模型的研究由来已久^[92-96]。Thamburaja 和 Anand^[97]最初将马氏体相变机制引入晶体塑性框架中,以研究 Ni-Ti 形状记忆合金的宏观力学响应,模型中总变形分为弹性变形和相变变形,忽略了位错滑移产生的塑性变形。在此基础上发展起来的更为广泛使用的模型考虑了塑性滑移,将变形梯度^[13, 98-99]分解为

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \mathbf{F}^tr \quad (84)$$

式中: $\mathbf{F}^e$ 、 $\mathbf{F}^p$ 、 $\mathbf{F}^tr$ 分别表示弹性变形、塑性变形以及相变对总变形梯度的贡献。

塑性变形包括母相与新相中的塑性滑移总和

$$\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = v_p \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \dot{\gamma}_\alpha \mathbf{m}_s^\alpha \otimes \mathbf{n}_s^\alpha + \sum_{i=1}^{N_i} v_i \sum_{\beta=1}^{N_\beta} \dot{\gamma}_\beta \mathbf{m}_s^\beta \otimes \mathbf{n}_s^\beta \quad (85)$$

式中: $v_p = 1 - v_N$ 表示母相的体积分, $v_N = \sum_{i=1}^{N_i} v_i$ 为相变后新相的总体积分, N_i 为变体的数量, N_α 和 N_β 分别代表母相和新相的滑移系, $\mathbf{m}_s^\alpha$ 和 $\mathbf{n}_s^\alpha$ 分别表示母相中的滑移方向和滑移面法向, $\mathbf{m}_s^\beta$ 和 $\mathbf{n}_s^\beta$ 分别为新相中的滑移方向和滑移面法向。当相变产生的新相的位错滑移能力较弱时,往往只计及母相中的塑性滑移^[100]。

马氏体相变过程的变形梯度为

$$\mathbf{F}^tr = \mathbf{I} + \sum_{i=1}^{N_i} v_i (\mathbf{b}' \otimes \mathbf{m}') \quad (86)$$

式中: $\mathbf{b}'$ 和 $\mathbf{m}'$ 分别为相变过程的切变向量和相变惯习面的法向。

4.2 相变驱动力与演化准则

相变模型的关键在于如何描述相变过程的驱动力以及相变的演化规律。本节将重点介绍在准静态和动态冲击下几种常用的相变驱动力与相变演化规律的模型。

4.2.1 相变驱动力

相变驱动力是与相变量功共轭的参量,取决于材料相变前后自由能的变化。在现有的研究中通常有两种方法描述相变驱动力与系统自由能的关系。第一种方法较为常见,直接将相变过程中 Gibbs 自由能的变化作为相变的驱动力。第二种方法以 Turteltaub 和 Suiker^[101-103] 为代表,认为相变驱动力在 Gibbs 自由能的变化之外还应额外加上一项相变熵增所导致的热驱动力,并指出这部分相变熵增并没有引起系统 Gibbs 自由能的变化。上述两种方法在相变驱动力与 Gibbs 自由能的关系表达式上存在区别,这一区别实际上来源于自由能定义的具体表达式和物理含义的不同,但是最终得到的相变驱动力是一致的,反映的物理规律是完全相同的。

相变驱动力与各热力学势函数之间的关系不完全相同^[98]

$$f_i = -\rho_0 \frac{\partial G}{\partial v_i} = \tau_m - \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial v_i} \quad (87)$$

式中: f_i 表示与相变量功共轭的相变驱动力, $\tau_m = \mathbf{F}^{\text{eT}} \mathbf{F}^{\text{e}} \mathbf{S} \mathbf{F}^{\text{tr-T}} : \mathbf{b}' \otimes \mathbf{m}'$ 表示相变过程的机械驱动力, ψ 、 G 分别为系统的 Helmholtz 自由能与 Gibbs 自由能。

Manchiraju 等^[104] 为研究 Ni-Ti 形状记忆合金中的相变过程, 给出了系统的亥姆霍兹自由能表达式

$$\psi(\mathbf{E}^{\text{e}}, \theta, v_i) = \frac{1}{2} \mathbf{E}^{\text{e}} : \mathbf{C} : \mathbf{E}^{\text{e}} - (\theta - \theta_0) \mathbf{A}_{\text{th}} : \mathbf{C} : \mathbf{E}^{\text{e}} + \frac{\lambda_T}{\theta_T} (\theta - \theta_T) v_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_i} v_i \sum_{u=1}^{N_i} \mathbf{h}_{iu} v_u \quad (88)$$

式中: θ 、 θ_0 、 θ_T 分别表示瞬时温度、初始温度和相变温度, λ_T 为单位体积的比热, $\mathbf{h}_{iu}$ 表示不同相变变体之间的相容关系。式 (88) 中: 第 1 项表示弹性应变能; 第 2 项表示与热应变对应的自由能; 第 3 项表示相变过程中的化学能; 第 4 项表示马氏体变体之间的相互作用能, 反映了变体之间的相互协调能力。

相变驱动力 f_i 可根据式 (87) 中与亥姆霍兹自由能的关系得到

$$f_i = \frac{\lambda_T}{\theta_T} (\theta - \theta_T) + v_i \sum_{u=1}^{N_i} \mathbf{h}_{iu} v_u + \mathbf{F}^{\text{eT}} \mathbf{F}^{\text{e}} \mathbf{S} \mathbf{F}^{\text{tr-T}} : \mathbf{b}' \otimes \mathbf{m}' \quad (89)$$

式中: $\mathbf{S}$ 为 PK II 应力。

此外, Feng 等^[105]、Greeff 等^[106] 认为在冲击高温高压作用下, 材料的相变驱动力主要依赖于系统的压强和温度。Cawkwell 等^[38] 根据材料在高压下的状态方程建立了一个评估两相 Gibbs 自由能的模型, 并给出了含能材料 RDX 的 α 与 γ 相在不同温度与压强下的 Gibbs 自由能之差, 见图 9^[38]。该模型简化了相变驱动力的组成部分, 忽略了两相的错配能以及相变的界面阻力等各个因素, 通常只适用于材料的高压冲击相变过程。

4.2.2 相变演化规律

相变过程中新相体积分数的演化依赖于相变的驱动力 f_i 和相变的临界阻力 f_c 。通常将相变过程中各种难以量化的阻力集合在一个总的相变临界阻力 f_c 。因此, 马氏体相变启动的临界条件为系统可提供的自由能达到马氏体相变的能垒

$$f_i = f_c \quad (90)$$

Turteltaub 等^[101-102]、Tjahjanto 等^[107] 认为相变启动之后新相的生长速率 $\dot{v}_i$ 依赖于驱动力与相变临界阻力的差值 ($f_i - f_c$), 并依此提出了一个唯象的相变演化的动力学关系

$$\dot{v}_i = \begin{cases} \dot{v}_{i0} \tanh\left(\frac{f_i - f_c}{k f_c}\right) & f_i - f_c > 0 \\ 0 & f_i - f_c \leq 0 \end{cases} \quad (91)$$

式中: k 为相变演化系数。

Thamburaja 等^[97, 108-110]、Manchiraju 等^[104] 则倾向于认为一旦相变驱动力 f_i 超过临界阻力 f_c , 马氏体相变过程会立即发生并释放系统的自由能, 从而使相变驱动力永远满足自洽关系 $f_i = f_c$, 因此新相的生成速率 $\dot{v}_i$ 可根据相变的自洽关系求解

$$\begin{cases} \dot{v}_i = 0 & f_i < f_c \\ \dot{v}_i > 0 & f_i = f_c \end{cases} \quad (92)$$

Barton 等^[111] 将上述唯象的相变演化动力学关系式 (式 (91)) 与固体状态方程相结合, 模拟了 Fe 在高压下的冲击相变 ($\alpha \leftrightarrow \varepsilon$), 如图 10^[111] 所示。

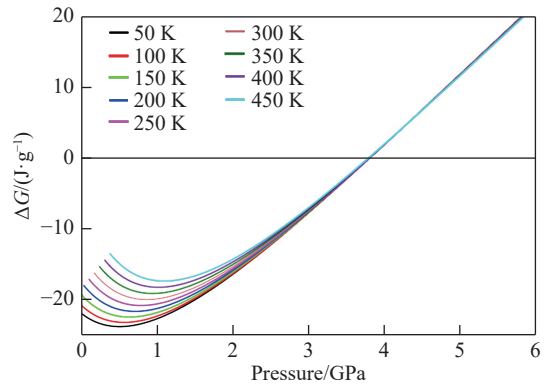
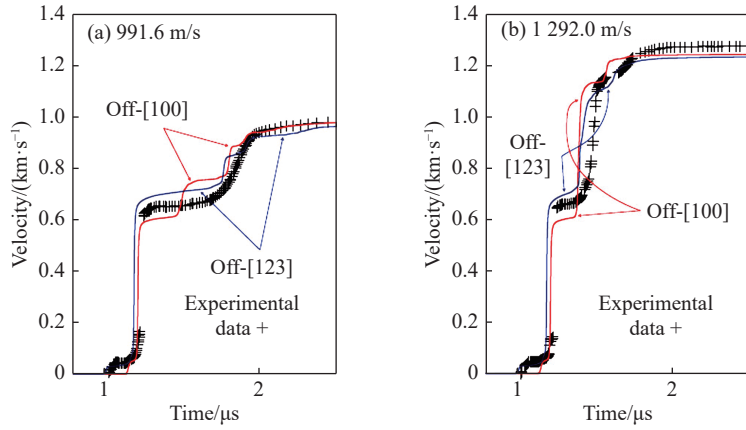


图 9 RDX 的 α 相与 γ 相 Gibbs 自由能之差与温度、压强的关系^[38]

Fig. 9 Difference between Gibbs free energies of the α and γ RDX polymorphs as a function of pressure and temperature^[38]

图 10 Fe 冲击相变的单晶模拟与多晶实验结果^[111]Fig. 10 Single crystal Fe simulation data and polycrystal experimental data of shock-induced phase transformation^[111]

此外, 考虑动态冲击过程中相变驱动力 (Gibbs 自由能) 依赖于压力和温度, Greeff 等^[106] 根据实验观察到的在一定压力区间内新相生长速率和压力满足指数关系, 提出了适用于冲击高压下的相变演化模型

$$\dot{v}_t^i = A \frac{\Delta G(p)}{B} \exp\left(\frac{\Delta G(p)}{B}\right)^2 \quad (93)$$

式中: $\Delta G(p)$ 为两相的 Gibbs 自由能之差, A 、 B 是与相变演化相关的材料参数。

5 动态孪生变形

对于 Ti^[112-113]、Zr^[10] 等密排六方结构 (hcp) 材料, 在冲击加载过程中, 孪生变形与位错滑移是系统发生塑性变形和释放能量的主要途径, 而相变往往需要更大的加载压力和应变速率^[105]。孪生变形通常出现在滑移受阻引起的应力集中区域, 通过均匀剪切的方式形成镜面对称的两部分晶体。由于孪生的应变速率敏感性通常低于位错滑移的应变速率敏感性^[114], 即孪生阻力随应变速率变化不大, 材料在高应变速率下比准静态下更倾向于发生孪生变形而非塑性滑移。因此, Cu^[12]、Al^[11, 115] 等滑移系较多的 fcc 材料在高压冲击过程中也能观察到显著的孪生变形。

5.1 孪生运动学

Kalidindi^[116] 最先将孪生变形引入晶体塑性框架中, 模拟了低层错能的多晶 fcc 金属 α -黄铜以及 hcp 金属 Zr 中的组织演化。Kalidindi 模型沿用了变形梯度的弹塑性分解

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \quad (94)$$

而塑性速度梯度包含材料的塑性滑移与孪生变形两部分

$$\mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^p (\mathbf{F}^p)^{-1} = \mathbf{L}_{sl} + \mathbf{L}_{tw} \quad (95)$$

对于体积分数通常较小的 fcc 和 bcc 孪晶而言, 往往只考虑母相中位错滑移而忽略孪晶内部的塑性滑移。但对于孪晶体积分数较大的情况如某些 hcp 金属, 孪晶中的位错滑移则不能忽略。因此, 塑性变形梯度中应同时包含母相和孪晶中的位错滑移

$$\mathbf{L}_{sl} = \left(1 - \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} f^\beta\right) \sum_{\alpha=1}^{N_{sl}} \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha + \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} f^\beta \sum_{\alpha=1}^{N_{sl}} \dot{\gamma}^\alpha \mathbf{Q}^\beta \mathbf{m}^\alpha \otimes \mathbf{n}^\alpha \mathbf{Q}^{\beta T} \quad (96)$$

式中: f^β 表示孪晶的体积分数, $\mathbf{m}^\alpha$ 和 $\mathbf{n}^\alpha$ 分别表示柏氏矢量与滑移面法向, $\mathbf{Q}^\beta$ 为孪生变形前后晶体位相的旋转矩阵

$$\mathbf{Q}^\beta = 2\mathbf{n}^\beta \otimes \mathbf{n}^\beta - \delta_{ij} \quad (97)$$

式中: δ_{ij} 为克罗内克符号。

孪生变形本身造成的速度梯度 $\mathbf{L}_{tw}$ 可由孪晶扩展方向 $\mathbf{m}_{tw}^\beta$ 与孪晶面法向 $\mathbf{n}_{tw}^\beta$ 表示

$$\mathbf{L}_{tw} = \sum_{\beta=1}^{N_{tw}} \gamma_{tw} \dot{f}^\beta \mathbf{m}_{tw}^\beta \otimes \mathbf{n}_{tw}^\beta \quad (98)$$

式中: γ_{tw} 为孪生的特征剪应变, fcc 和 bcc 晶体中 $\gamma_{tw} = \frac{\sqrt{2}}{2}$, hcp 晶体中 $\gamma_{tw} = \frac{c^3/a^3 - 3}{\sqrt{3}c/a}$ [117]。

此外, Clayton [118] 采用将孪生变形从塑性变形中独立出来的三构型分解方法

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^I \mathbf{F}^p \quad (99)$$

式中: $\mathbf{F}^e$ 表示可逆的热弹性变形梯度, $\mathbf{F}^p$ 表示体积守恒的塑性滑移变形梯度, $\mathbf{F}^I$ 表示孪生变形以及由空位等缺陷引起的不可逆体积变形。

5.2 孪晶演化规律与硬化模型

材料的孪生过程与相变过程类似, 孪晶的体积分数演化取决于孪生的驱动力和孪生阻力, 但晶体塑性模型中孪生模型与相变模型对关键因素的处理却存在差异。相变模型细化了材料在不同情况下的各种相变驱动力, 将各种难以量化的相变阻力简单地归纳为一个临界相变阻力常数。而孪生模型的驱动力即为材料内部在孪生方向上的分切应力, 其孪生阻力则需要考虑孪晶自身的硬化、滑移和孪生相互作用导致的硬化以及孪晶饱和体积分数等因素。

5.2.1 孪晶演化规律

目前缺乏简洁明确的物理方程以及相关理论模型描述孪晶的演化过程, 因此在晶体塑性框架中通常采用率相关的唯象模型作为孪晶的演化法则 [19]

$$\dot{f}^\beta = \begin{cases} \frac{\dot{\gamma}_0}{\gamma_{tw}} \left(\frac{\tau^\beta}{s_{tw}^\beta} \right)^{1/m} & \tau^\beta > 0 \\ 0 & \tau^\beta \leq 0 \end{cases} \quad (100)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为参考滑移速率, τ^β 为孪晶方向上的分切应力, s_{tw}^β 表示孪晶系的孪生阻力。

5.2.2 硬化模型

存在变形孪晶的材料, 其应变硬化通常是一个多因素影响的复杂过程。Salem 等 [119-120] 总结了 hcp 材料中滑移与孪生的主要硬化效应: (1) 变形孪晶对所有滑移系和孪晶系均有硬化效果; (2) 孪晶界具有与晶界相似的 Hall-Petch 效应, 对母相中的位错滑移存在硬化作用; (3) Basinski 硬化机制 (孪晶扩展过程中将可动位错固化缠结) 会导致孪晶强度大于基体母相, 并提高材料整体强度; (4) 孪晶体积分数通常存在饱和值, 材料在孪晶体积分数达到饱和后将采用位错滑移作为单一的塑性变形方式。

5.2.2.1 唯象硬化模型

基于上述分析结果, Kalidindi [121] 提出了饱和型位错滑移和孪生变形的唯象硬化模型, 将位错滑移阻力随时间的变化率表示为

$$\dot{S}_{slip}^\alpha = h_s (1 + C \sum_{\beta} f^\beta) \left(1 - \frac{S_{slip}^\alpha}{S_{sa}^\alpha} \right)^a \sum_k \dot{\gamma}^k \quad (101)$$

$$S_{sa}^\alpha = s_{sa0} + s_{pr} \left(\sum_{\beta} f^\beta \right)^{0.5} \quad (102)$$

式中: h_s 为孪晶初始硬化率, a 为硬化指数, 系数 C 表示 Basinski 硬化机制对滑移系的硬化作用, s_{pr} 描述了孪晶界引起的 Hall-Petch 效应, s_{sa0} 为没有孪生时的滑移饱和阻力。

类似地, 孪生阻力的演化过程可表示为

$$\dot{S}_{tw}^\beta = h_{tw} \left(\sum_m f^m \right)^b \sum_k \gamma_{tw} \dot{f}^k + h_{tw-s} \left(\sum_{\alpha} \gamma^\alpha \right)^d \sum_k \dot{\gamma}^k \quad (103)$$

式中: h_{tw} 、 $h_{\text{tw-s}}$ 分别表示孪晶和位错滑移对孪生阻力的硬化系数, b 、 d 为硬化指数。式 (103) 中第 1 项表示孪晶内部的硬化作用, 第 2 项表示位错滑移与孪生过程相互作用引起的硬化。Salem 等^[120] 指出由于式 (103) 中第 2 项的快速硬化作用, 孪晶体积分数随着应变增大逐渐达到饱和值。

5.2.2.2 基于位错密度的硬化模型

滑移阻力与孪生阻力的硬化过程实际上取决于材料中不同微观结构的演化以及变形中的应变率和温度^[122-123]。位错在滑移过程中除了受到晶格阻力和林位错的硬化阻力之外, 还需考虑晶界阻力的作用, 对于晶界阻力 (即 Hall-Petch 效应), 则需要额外考虑孪晶界引起的阻碍作用。Beyerlein 等^[124] 在位错模型中考虑了林位错硬化、位错碎片 (Dislocation Debris) 硬化以及 Hall-Petch 效应等对位错滑移的硬化作用, 将滑移阻力分为

$$S_{\text{slip}}^{\alpha} = S_0^{\alpha} + S_{\text{for}}^{\alpha} + S_{\text{deb}}^{\alpha} + S_{\text{HP}}^{\alpha} \quad (104)$$

$$S_{\text{for}}^{\alpha} = \alpha \mu b^{\alpha} \sqrt{\rho^{\alpha}} \quad (105)$$

$$S_{\text{deb}}^{\alpha} = k_{\text{deb}} \mu b^{\alpha} \sqrt{\rho_{\text{deb}}^{\alpha}} \lg \left(\frac{1}{b^{\alpha} \sqrt{\rho_{\text{deb}}^{\alpha}}} \right) \quad (106)$$

$$S_{\text{HP}}^{\alpha} = \mu H^{\alpha} \sqrt{\frac{b^{\alpha}}{d_{\text{mfp}}^{\alpha}}} \quad (107)$$

式中: S_0^{α} 为初始滑移阻力, S_{for}^{α} 为林位错硬化阻力, 关于位错密度的演化详见 3.2.2 节; $\rho_{\text{deb}}^{\alpha}$ 为位错碎片密度, 通常指具有一定分布规律的固定的不可动位错, 由于位错碎片分布的非随机性, 如式 (105) 所示, 需要对硬化公式中平均障碍距离 ($d \approx 1/\sqrt{\rho}$) 进行一定的校正^[125]; S_{HP}^{α} 是由晶界与孪晶界共同引起的 Hall-Petch 效应阻力, H^{α} 为硬化常数, b^{α} 为柏氏矢量。Ardelean 等^[122] 提出 Hall-Petch 效应中位错的平均自由程 d_{mfp} 与孪晶的体积分数相关

$$d_{\text{mfp}} = \begin{cases} \frac{(1-f)d_c}{\sin \theta} & \text{有孪晶} \\ d_g & \text{无孪晶} \end{cases} \quad (108)$$

式中: f 为孪晶的体积分数, d_c 为孪晶间距, θ 为滑移面与孪晶面之间的夹角, d_g 为初始晶粒尺寸。

孪晶的扩展过程与位错滑移过程类似, 均受到晶界与位错的阻碍作用。但是不同于位错在晶界处的塞积作用, Hall-Petch 效应对孪晶的硬化作用目前并没有明确的物理模型。此外, 孪晶扩展与位错之间的相互作用也不再是简单的林位错硬化, 而是同时取决于位错密度以及滑移系与孪晶系的柏氏矢量。孪生阻力 S_{twin}^{β} 可分为初始孪生阻力、Hall-Petch 效应以及位错滑移相互作用 3 部分的贡献

$$S_{\text{twin}}^{\beta} = S_0^{\beta} + S_{\text{HP}}^{\beta} + S_{\text{slip}}^{\beta} \quad (109)$$

$$S_{\text{HP}}^{\beta} = \frac{H^{\beta}}{\sqrt{d_{\text{mfp}}^{\beta}}} \quad (110)$$

$$S_{\text{slip}}^{\beta} = \mu \sum_{\alpha} C^{\alpha\beta} b^{\alpha} b^{\beta} \rho^{\alpha} \quad (111)$$

式中: S_0^{β} 为初始孪生阻力, S_{HP}^{β} 为 Hall-Petch 效应对孪晶系的阻碍作用, S_{slip}^{β} 代表位错滑移与孪晶扩展之间的相互作用, $C^{\alpha\beta}$ 为位错滑移对孪生的硬化矩阵。位错滑移对孪晶扩展并不只有抑制作用 ($C^{\alpha\beta} > 0$), 在一些特殊情况下, 位错滑移能促进孪晶的形核与扩展^[126-128] ($C^{\alpha\beta} < 0$)。

6 动态破坏

高压、高应变速率冲击加载条件下的材料破坏过程与微观机理等问题, 是动态变形与破坏领域的另一个重要问题。层裂和绝热剪切断裂是两种典型的材料动态破坏方式^[52]。

层裂是冲击波经样品自由表面反射产生的反向卸载稀疏波与来自加载面的正向卸载稀疏波相互

作用(迎面相遇),产生拉应力,从而引起材料发生宏观脆性断裂的现象。层裂过程包括微孔洞形核、长大并汇合形成断裂面,微孔洞所在区域存在应变局域化特征。

绝热剪切带是材料在高速动态变形过程中由于局部温升过高引起热软化,在微观上发生剪切变形局域化的现象。由于变形时间极短,变形产热来不及扩散,剪切变形局域化几乎在绝热条件下进行。绝热剪切带表现为细长的窄带,其演变包括萌生、扩展和断裂3个阶段。

材料在动态破坏过程中的微观结构动态演化缺少直接的测量结果,动态晶体塑性有限元方法对动态破坏力学响应和微观结构演化的预测及分析对于相关实验研究尤为重要。关于动态层裂破坏的模拟,主要介绍两种将损伤引入晶体塑性模型的方法;关于绝热剪切带的模拟,分别从忽略损伤和直接引入损伤两种思路对动态晶体塑性模拟方法进行具体介绍。

6.1 层 裂

层裂是材料动态破坏的一种特殊形式。受高速冲击加载时,材料内部两个卸载稀疏波相互作用,一旦材料中局部应力达到材料的动态强度极限即发生断裂,如图11^[52]所示。因此,层裂是结构动态响应(波的交互作用)和材料动态响应(材料动态强度极限或破坏准则)共同作用的结果^[51]。

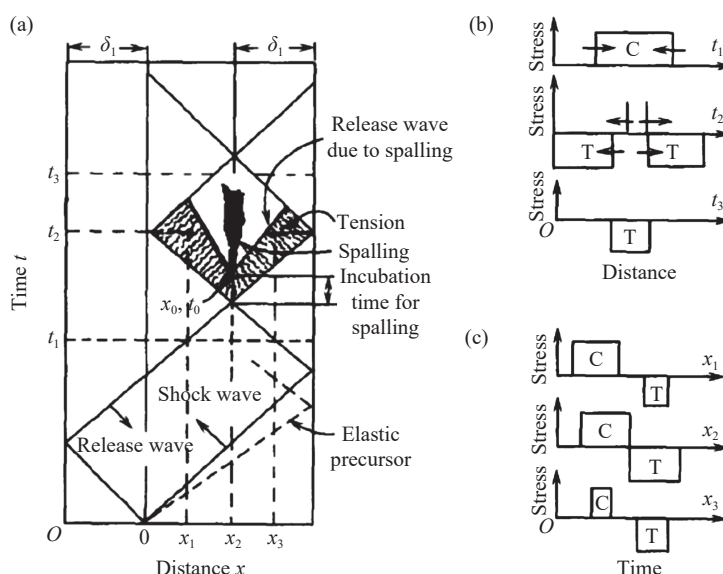


图 11 冲击变形过程中波的传播及层裂现象 (a)、3 个时刻的应力波形 (b) 和 3 个位置的应力历史 (c)^[52]

Fig. 11 Wave propagation and spalling phenomenon (a), stress profiles at three different times (b), as well as stress histories at three different positions (c) during shock deformation^[52]

采用动态晶体塑性有限元对冲击层裂现象的研究主要有两种方法:(1)在动态晶体塑性模型中引入层裂破坏准则,通过显式地删除单元实现材料的损伤形核及其演化;(2)将材料视为有微孔洞的多孔晶体材料,在动态晶体塑性模型中基于孔洞体积在变形过程中的演化引入材料的损伤演化。下面具体介绍这两种动态冲击变形中层裂破坏的模拟方法。

6.1.1 考虑层裂破坏准则的晶体塑性模型

直接引入材料损伤是晶体塑性模拟动态层裂破坏的一个重要方法。依据损伤形核的难易程度,将晶体材料划分为不易损伤的晶内材料和易出现损伤形核点的结构(如晶界、第二相粒子处等),对两者分别建立不同的材料模型进行研究。对晶内材料建立动态晶体塑性有限元模型,模拟动态冲击压缩过程中的晶内微观塑性变形行为;对晶体材料中易出现损伤形核点的结构,建立各向同性的宏观模型进行动态变形模拟,并结合层裂破坏准则对损伤形核进行定量预测。一旦模型中某个单元满足层裂破坏准则即成为损伤形核点,人为地将相应的单元抹去,即在模型中引入微孔洞。随着动态冲击变形的继续发生,微孔洞将会长大、合并。

材料失效模型通常有两类: 内聚应力准则和损伤积累准则^[129]。内聚应力准则假定材料失效是瞬态行为, 当材料中的局部应力达到晶体的内聚应力即理论断裂强度时, 材料立刻发生断裂。损伤积累准则假定材料失效依赖于变形历史, 断裂的发生不仅与应力大小相关, 还与应力持续时间相关。现有的动态层裂破坏晶体塑性有限元研究均简单地采用内聚应力准则, 考虑到高应变速率变形中存在明显的断裂滞后现象, 后续研究有待将损伤积累准则引入动态晶体塑性模型中。下面介绍两种典型的内聚应力准则: 最大正拉应力准则和复合模式的最大应力准则。

最大正拉应力准则可表示为^[130]

$$\sigma \geq \sigma_c \quad (112)$$

当材料所受正拉应力 (σ) 达到临界值 (σ_c) 时, 则发生层裂破坏。Zhang 等^[131]、Lloyd 等^[132] 分别以晶界和第二相粒子作为损伤形核点, 采用该准则判断裂纹形核, 通过动态晶体塑性有限元模拟冲击变形卸载过程中的层裂破坏现象。

复合模式的最大应力准则可表示为^[23-24, 57-58]

$$s = s_0 + s_1 (\Delta T), \quad \tau = \tau_0 + \tau_1 (\Delta T) \quad (113)$$

式中: s 、 τ 分别为界面上的正应力和切应力, s_0 、 τ_0 分别为参考正应力和参考切应力, ΔT 为变形过程中的温升, s_1 、 τ_1 分别为依赖于温升的临界正应力增量和临界切应力增量。当材料局部正应力或切应力超过对温度线性依赖的内聚界面强度时, 均会引起材料的局部裂纹形核, 随后由正应力和切应力主导的损伤演变略有不同。Clayton^[23, 57-58]、Vogler 等^[24] 将晶界视为损伤易形核点, 采用该准则判断裂纹形核, 模拟结果如图 12(a) 和图 12(b) 所示。样品右侧区域层裂开始形核, 该区域材料承受着较大的拉伸应力, 即层裂区域附近具有较大的弹性能。动态层裂破坏表现为晶间断裂, 并且飞片的冲击加载速度越大, 材料的层裂破坏越强烈, 如图 12(c) 和图 12(d) 所示。

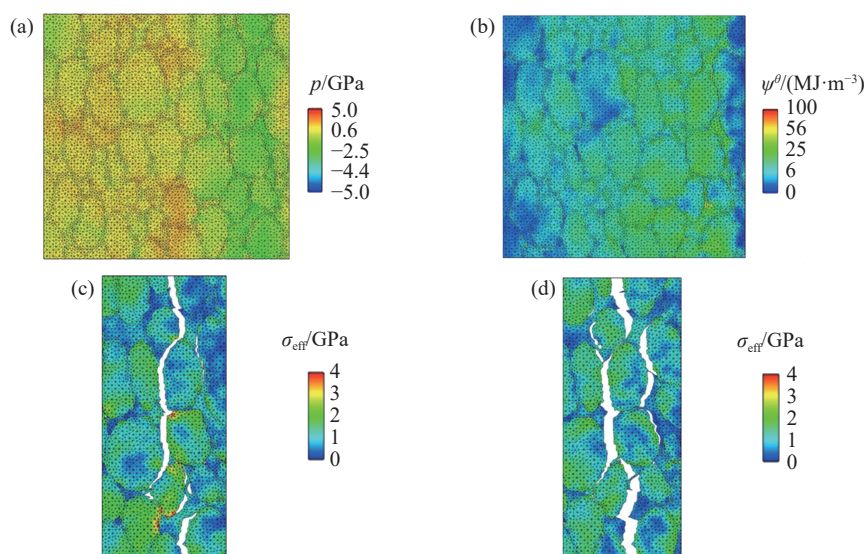


图 12 铝合金动态晶体塑性有限元模拟结果: (a) 层裂形核时的压力, (b) 层裂形核时的弹性能密度, (c) 经 250 m/s 冲击加载层裂面附近的等效应力; (d) 经 350 m/s 冲击加载层裂面附近的等效应力^[24]

Fig. 12 Dynamic crystal plasticity finite element simulation results of lead alloy: (a) pressure of spalling nucleation; (b) elastic energy density of spalling nucleation; (c) equivalent stress near the spalling surface under 250 m/s shock loading; (d) equivalent stress near the spalling surface under 350 m/s shock loading^[24]

6.1.2 基于孔洞体积演化的晶体塑性模型

不同于在无缺陷材料中逐步引入材料损伤 (如 6.1.1 节), 将材料视为有微孔洞的多孔晶体材料, 以孔洞的体积变化表征材料微观损伤演变, 是研究材料动态层裂破坏的另一个重要思路。

多孔晶体在动态弹塑性大变形过程中, 不再满足塑性变形体积不变假设 (Ling 等^[133]), 即 $\det(\mathbf{F}^p) \neq 1$,

需要考虑孔洞引起的不可逆塑性体积变形。Nguyen 等^[134-135] 在多孔晶体变形运动学中将塑性变形分为体积变形和等体积变形两部分,将变形梯度表示为

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^e \mathbf{F}^p \mathbf{F}^d \quad (114)$$

式中: $\mathbf{F}^e$ 、 $\mathbf{F}^p$ 、 $\mathbf{F}^d$ 分别为弹性变形梯度、塑性等体积变形梯度和塑性体积变形梯度,如图 13^[134] 所示。通过显式考虑动态冲击变形过程中孔洞引起的不可逆体积变化 $\det(\mathbf{F}^d)$,可以保证塑性等体积变形依然满足 $\det(\mathbf{F}^p) = 1$ 。引入孔隙度 (φ) 状态变量表示孔洞在块体材料中的体积比,用于描述孔洞引起的不可逆体积变形梯度

$$\mathbf{F}^d = \sqrt[3]{\frac{1-\varphi_0}{1-\varphi}} \mathbf{I} \quad (115)$$

式中: $\varphi_0 = V_0^{\text{voids}}/V_0$ 、 $\varphi = V_d^{\text{voids}}/V_d$ 分别为参考构型 (B_0) 和损伤构型 (B_d) 中的孔隙度, V_0^{voids} 、 V_d^{voids} 分别为参考构型和损伤构型中孔洞的体积, V_0 、 V_d 分别为参考构型和损伤构型中块体材料的体积。同时,假设块体材料中的实心部分经历塑性变形时体积不变,即 $V_0 - V_0^{\text{voids}} = V_d - V_d^{\text{voids}}$ 。初始孔隙度的下限为零,表示无孔洞的实心材料。

损伤对动态晶体塑性本构方程的影响主要包括 3 方面: 孔隙度对弹性本构的影响、孔隙度对塑性本构的影响以及多孔晶体中孔隙度本身的演变。首先,孔隙度对弹性本构的影响主要表现为弹性模量对孔隙度的依赖^[134-135]

$$\mathbf{S} = \mathbf{C}^d(\mathbf{C}, \varphi) : \mathbf{E}^e \quad (116)$$

式中: $\mathbf{C}$ 、 $\mathbf{C}^d$ 分别为无损伤和有损伤材料的弹性模量, $\mathbf{E}^e$ 、 $\mathbf{S}$ 分别为格林-拉格朗日应变和 PK II 应力。随动态冲击变形过程中孔隙度 φ 的增大,多孔晶体材料的弹性模量 $\mathbf{C}^d$ 不断减小。其次,孔隙度对塑性本构的影响主要表现为塑性滑移速率对孔隙度及其变化率的依赖

$$\begin{cases} \dot{\gamma}^\alpha = \dot{\Gamma}^\alpha + \frac{M}{n_{\text{slip}}} \dot{\gamma}_{\text{eq}} \text{sgn}(\dot{\gamma}^\alpha) \\ \dot{\gamma}_{\text{eq}} = \frac{2}{3} \frac{|\dot{\varphi}|}{\varphi - \varphi^2} \end{cases} \quad (117)$$

式中: 与孔隙度无关的塑性滑移速率 $\dot{\Gamma}^\alpha$ 由速度梯度的塑性分量确定 ($\mathbf{L}^p = \sum \dot{\Gamma}^\alpha \mathbf{s}_0^\alpha \otimes \mathbf{m}_0^\alpha$); M 为泰勒因子; n_{slip} 为滑移系数目; $\dot{\gamma}_{\text{eq}}$ 是与微观尺度晶格振动相关的各向同性等效塑性应变速率; 孔隙度 φ 是孔洞半径 (a) 和相邻孔洞中心距 (l) 之比的函数, $\varphi = (a/l)^3$; $\dot{\varphi}$ 为孔隙度随时间的变化率。式 (117) 实质上是以 $\dot{\gamma}_{\text{eq}}$ 作为桥梁, 建立各向同性的等效塑性应变速率 $\dot{\gamma}_{\text{eq}}$ 与孔隙度的关系, 对与孔隙度无关的塑性滑移速率 $\dot{\Gamma}^\alpha$ 进行修正, 从而建立滑移系 α 上塑性滑移速率 $\dot{\gamma}^\alpha$ 与孔隙度的关系。最后, 基于孔洞径向动量守恒方程, 得到孔隙度随时间的演变方程

$$\frac{1}{3} \rho l^2 \left[\frac{1 - \sqrt{\varphi}}{\sqrt{\varphi}(1 - \varphi)} \ddot{\varphi} - \frac{1 - 12\varphi - 11\varphi^{4/3}}{6\varphi^{4/3}(1 - \varphi)^2} \dot{\varphi}^2 \right] = (\Sigma_m - R) \text{sgn}(\dot{\varphi}) \quad (118)$$

式中: ρ 为基体材料密度, l 为相邻孔洞之间的中心距, Σ_m 为平均宏观柯西应力, R 为材料的等体积变形阻力。

上述方法能够有效地对多孔晶体中孔洞的长大进行模拟, Ling 等^[133] 通过比较多孔晶体塑性模拟得到的横向应变和纵向应变的相对大小判定孔洞合并。他们发现: 一方面某些取向的单晶材料在应力三轴度很小且应变很高时仍无孔洞合并发生, 这显然与实际不符; 另一方面孔洞合并临界应变依赖于

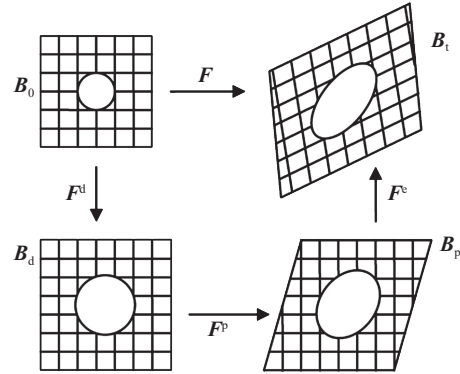


图 13 多孔晶体的变形梯度分解为弹性部分 ($\mathbf{F}^e$)、不可逆偏量部分 ($\mathbf{F}^p$) 和不可逆体积变形部分 ($\mathbf{F}^d$)^[134]

Fig. 13 Decompose deformation gradient of porous crystal into elastic part ($\mathbf{F}^e$) and irreversible volumetric part ($\mathbf{F}^p$) and irreversible volumetric part ($\mathbf{F}^d$)^[134]

晶粒取向和应力三轴度, 而临界孔隙度仅依赖于晶粒取向, 如图 14^[133] 所示。因此, 在动态多孔晶体塑性模拟中引入孔洞合并准则是有必要的, 相比临界应变, 采用仅依赖于晶粒取向的临界孔隙度作为判据更为合适。

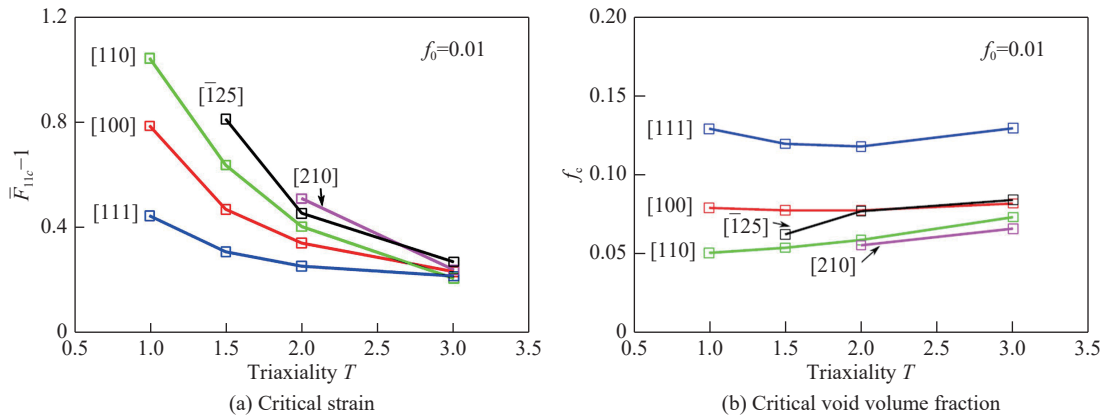


图 14 晶粒取向和应力三轴度对孔洞合并的临界状态变量的影响^[133]

Fig. 14 Influence of grain orientation and stress triaxiality on critical state variables for void coalescence^[133]

6.2 绝热剪切带

绝热剪切带是材料在动态高应变速率加载变形过程中常发生的剪切变形局域化现象, 最终会导致材料动态断裂^[136-137]。Zener 和 Hollomon^[138] 最早提出绝热剪切带的形成是热软化克服材料加工硬化的结果, 并将微观绝热剪切带的形成与材料宏观热塑性软化 (即变形后期应力-应变曲线发生下降) 联系在一起, 见图 15^[51] 中 Stage 3。绝热剪切带的基本特征包括: 微观上观察到的绝热剪切带、宏观应力-应变曲线上发生热塑性失稳、高速变形过程接近绝热过程^[51]。剪切局域化机理包含两方面竞争因素: 促进形成剪切局域化的正面因素 (即热软化和几何软化) 和不利于剪切局域化的负面因素 (即应变硬化和应变率硬化)^[52]。

高速冲击变形过程中绝热剪切带的晶体塑性模拟研究主要有两种方法: (1) 忽略损伤, 直接模拟冲击变形过程中的塑性变形和温度演化, 根据模拟结果在后处理中观测和分析绝热剪切带现象; (2) 引入材料微观损伤, 模拟动态冲击变形过程中绝热剪切带的形核及演化。下面分别对这两种方法进行具体介绍。

6.2.1 忽略损伤的晶体塑性模型

高速变形下绝热剪切的动态晶体塑性有限元研究可以追溯到 20 世纪 90 年代, 采用忽略损伤的动态晶体塑性有限元能够直接对高温、高压、高应变速率下绝热剪切带的形成及演变进行模拟。Hines 等^[139]、Lee 等^[140] 基于单晶体弹塑性理论, 忽略热效应, 采用经典的应变率相关的唯象硬化本构方程, 粗略地模拟了动态加载下的剪切带现象。Bronkhorst 等^[141]、Tajalli 等^[59] 考虑塑性变形产热以及热软化效应, 基于高速变形中的绝热假设进行热力耦合计算, 采用唯象的动态晶体塑性有限元模拟分析绝热剪切局域化现象。考虑到动态变形温升显著并且对材料弹塑性本构具有重要影响^[142], Bargmann

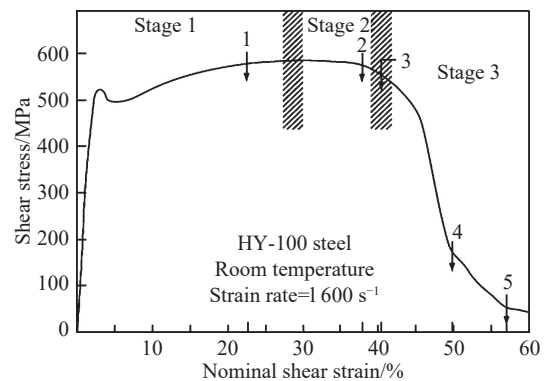


图 15 经典应力-应变曲线上塑性变形的 3 个阶段 (Stage 1: 均匀变形; Stage 2: 非均匀变形; Stage 3: 宏观热塑性失稳)^[51]

Fig. 15 Three stages of plastic deformation appeared on classical stress-strain curve (Stage1: homogeneous deformation; Stage2: inhomogeneous deformation; Stage3: macroscopic thermoplastic instability)^[51]

等^[143]进一步考虑热弹性耦合效应和热传导效应,对动态变形温升进行更加精确的计算。他们同时考虑塑性产热、弹性产热以及热传导对温升的贡献,采用动态梯度晶体塑性有限元模拟 $10^4 \sim 10^7 \text{ s}^{-1}$ 应变速率范围的材料冲击变形行为。通过比较不同应变速率、相同变形程度的模拟结果,发现相比于高应变速率 (10^7 s^{-1}) 的动态变形,材料在相对较低应变速率 ($5 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$) 下的动态变形过程中热传导效果明显,其温度梯度更为平缓,如图 16 所示。

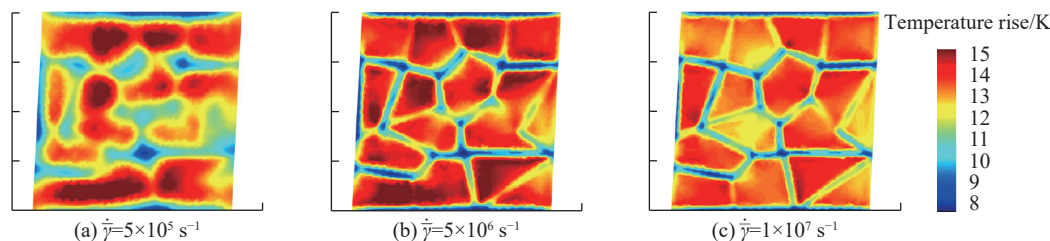


图 16 不同累积滑移速率变形 $\bar{\gamma}=0.05$ 时的温升云图^[143]

Fig. 16 Distribution of temperature increase when $\bar{\gamma} = 0.05$ for different accumulated slip rates^[143]

采用上述动态晶体塑性有限元模型已经能够模拟绝热剪切带的形成,根据模拟得到的应力-应变曲线上热塑性失稳转折点的力学状态(如应变、应变率、剪切模量或变形能等),进一步给出热塑性失稳等效判据,能够有效地对微观上可观察到的绝热剪切带形成的临界点进行预测和分析。当材料受到动态高速载荷时,虽然应力在屈服点附近可能存在短暂下降,但是宏观应力-应变曲线整体上首先经历一段上升,随后曲线发生持续性下降,如图 15 所示。通常认为曲线上峰值转折点(即 $d\sigma/d\varepsilon = 0$ 或 $d\tau/d\gamma = 0$)处宏观上开始发生热塑性失稳,同时意味着微观上开始形成绝热剪切带。发生宏观热塑性失稳时,除宏观应力之外,其他的变形或状态参量也会达到相应的临界值,相应地就有其他等效判据,共有 4 种:临界应变判据^[144-147]、临界应变率判据^[148]、临界剪切模量判据^[149-151]、临界变形能判据^[152]。Zhang 等^[147]通过动态晶体塑性有限元模拟得到的等效塑性应变云图上出现了绝热剪切带,如图 17 所示。进一步采用临界应变判据能够预测宏观热塑性失稳临界点,即微观绝热剪切带形成的临界状态。他们根据模拟得到的宏观应力-应变曲线,对热塑性失稳转折点处的应变状态进行统计(见图 18),发现动态压缩过程中形成绝热剪切带的临界应变约 4.5%,动态剪切过程中的临界应变约为 3.7%。

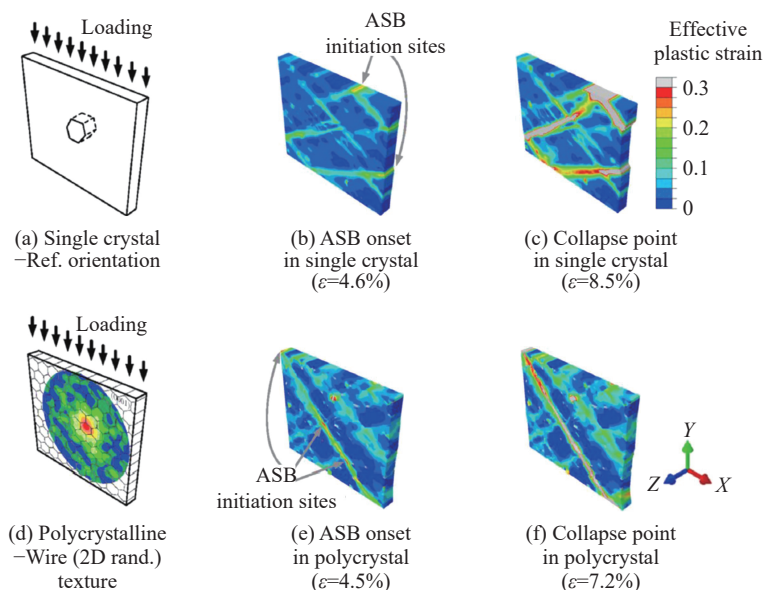


图 17 hcp 单晶和多晶样品在 10^5 s^{-1} 应变率下的绝热剪切局域化^[147]

Fig. 17 Adiabatic shear localization of hcp single crystal and polycrystalline samples under 10^5 s^{-1} strain rate^[147]

6.2.2 引入损伤的晶体塑性模型

从微观角度考虑损伤的形核和演变机制是研究动态绝热剪切破坏的另一种重要方法。将损伤作为材料状态变量引入动态晶体塑性模型时, 需要考虑 3 个方面: 引入损伤的弹性本构、损伤驱动力以及变形过程中损伤的演变。Boubaker 等^[153]在超弹性本构方程中引入材料损伤, 将弹性自由能视为弹性应变、温度和损伤变量的函数, 将塑性自由能视为滑移速率和损伤变量的函数, 将应力对损伤的依赖归因于弹性模量随损伤变量的变化, 从而得到依赖于损伤的自由能和应力

$$\begin{cases} \psi = \psi^e(\mathbf{E}^e, T, D) + \psi^p(\dot{\gamma}^\alpha, D) \\ \mathbf{S} = \rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{E}^e} = \mathbf{C}^*(T, D) : (\mathbf{E}^e - \alpha \Delta T) \end{cases} \quad (119)$$

式中: ψ 为比自由能, ψ^e 、 ψ^p 分别为比自由能的弹

性和塑性分量, $\mathbf{S}$ 、 $\mathbf{E}^e$ 分别为 PK II 应力和弹性格林-拉格朗日应变张量, T 为瞬态温度, D 为损伤变量, $\dot{\gamma}^\alpha$ 为滑移系 α 上的塑性滑移速率, ρ_0 为初始材料密度, $\mathbf{C}^*(T, D)$ 为依赖于温度和损伤的弹性模量, $\alpha \Delta T$ 表示热膨胀应变。这里与式 (116) 相比增加了热膨胀构型, 因此在应力表达式中采用了纯弹性应变, 详见 2.2.2 节。其次, 热力学损伤驱动力可以通过自由能对损伤的依赖性得到

$$Y = -\rho_0 \frac{\partial \psi}{\partial D} = -\mathbf{E}^e : \frac{\partial \mathbf{C}^*}{\partial D} : \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^e - \alpha \Delta T \right) + \frac{1}{1-D} \frac{1}{2} \sum_{\alpha} g^{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} \quad (120)$$

式中: Y 为损伤驱动力, g^{α} 为滑移系 α 上的滑移阻力。显然, 损伤驱动力和损伤变量是功共轭的。最后, 损伤变量在动态变形过程中的演变可以通过损伤驱动力与损伤演化阻力比值的幂函数表示

$$\dot{D} = \left(\frac{Y}{Y_r} \right)^m \|\mathbf{L}^p\| (1-D) \quad (121)$$

式中: Y_r 为参考损伤演化阻力, $\mathbf{L}^p$ 为速度梯度张量的塑性分量。在初始未变形条件下, 损伤驱动力和损伤变量均为零; 当材料受冲击载荷开始变形, 则存在损伤驱动力, 损伤变量不再为零, 意味着材料发生损伤形核; 在随后的变形过程中, 损伤变量按式 (121) 随时间而变化, 表示材料中损伤的演变规律。通过这样的方式, 将连续介质损伤模型与晶体塑性模型进行耦合, 能够有效地模拟动态绝热剪切破坏现象。

7 总结与展望

动态晶体塑性有限元对于研究高温、高压、高应变速率加载条件下的材料动态冲击力学响应和微观结构演化具有重要作用, 但是如何对材料在动态冲击下微观变形的物理机制进行准确的描述仍然存在许多的发展空间。

在理论模型方面, 动态晶体塑性有限元能够有效地反映晶体塑性滑移的各向异性、对微观组织的依赖性以及考虑动态冲击下各种影响变形的宏观因素与微观机制。与准静态晶体塑性模型相比, 动态晶体塑性模型考虑了材料在高压下的非线性弹性响应、显著温升引起的热弹性耦合效应以及高速运动位错具有的声子拖曳效应等。但是目前对于冲击下位错高速滑移过程中位错之间的相互作用与位错形核、增殖的演化规律缺乏足够的认识, 在未来的研究中可基于多尺度模拟框架, 从分子动力学与位错动力学出发, 探究位错在高速滑移的滑移特征和演化规律。

在应用研究方面, 动态晶体塑性有限元能够应用于位错滑移、相变、孪晶和动态损伤破坏等变形

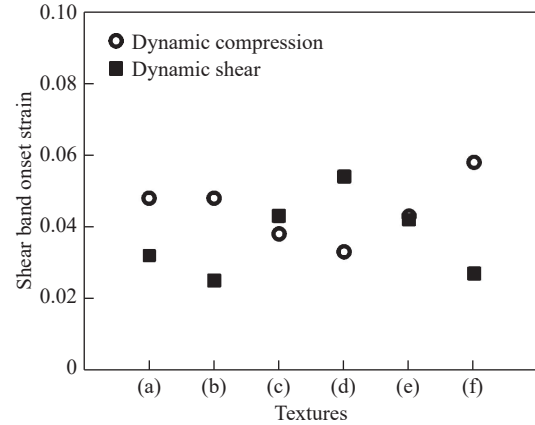


图 18 动态冲击载荷下 6 种织构材料中形成绝热剪切带的临界应变 ($V_{\text{peak}} = 20 \text{ m/s}$)^[147]

Fig. 18 Critical strain of adiabatic shear band nucleated in 6 different texture materials under dynamic shock loading ($V_{\text{peak}} = 20 \text{ m/s}$)^[147]

与破坏机制研究中。现有的动态晶体塑性模型通过引入局部相变体积分数或孪晶体积分数及其演化规律,研究相变与孪晶对材料变形的影响,但这种方法只能均匀化地将相变与孪晶的影响简化为对材料点应力的影响,无法反映真实的相变过程与孪晶演化过程。在未来研究中可考虑将动态晶体塑性模型与相场模型相结合描述动态冲击下的相变和孪生过程。除了将动态晶体塑性模型应用于动态损伤破坏的定性研究,还可分别结合宏观破坏准则和微观损伤形核及演化准则,对动态冲击变形过程中的层裂和绝热剪切带进行定量预测和分析。从微观损伤演化的角度,对动态层裂和绝热剪切破坏的动态晶体塑性研究尚处于发展阶段,目前的损伤主要以引入损伤系数进行唯象的模拟为主,后续研究中需要更多地考虑基于物理的晶体动态损伤机制。

参考文献:

- [1] BODNER S R, PARTOM Y. Constitutive equations for elastic-viscoplastic strain-hardening materials [J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1975, 42(2): 385–389.
- [2] JOHNSON G R. A constitutive model and data for materials subjected to large strains, high strain rates, and high temperatures [J]. *Proceeding of the 7th International Symposium on Ballistics*, 1983: 541–547.
- [3] ZERILLI F J, ARMSTRONG R W. Dislocation-mechanics-based constitutive relations for material dynamics calculations [J]. *Journal of Applied Physics*, 1987, 61(5): 1816–1825.
- [4] STEINBERG D J, COCHRAN S G, GUINAN M W. A constitutive model for metals applicable at high-strain rate [J]. *Journal of Applied Physics*, 1980, 51(3): 1498–1504.
- [5] GUPTA Y M, DUVAL G E, FOWLES G R. Dislocation mechanisms for stress relaxation in shocked LiF [J]. *Journal of Applied Physics*, 1975, 46(2): 532–546.
- [6] ASAY J R, FOWLES G R, DURALL G E, et al. Effects of point defects on elastic precursor decay in LiF [J]. *Journal of Applied Physics*, 1972, 43(5): 2132–2145.
- [7] WOLFER W G. Phonon drag on dislocations at high pressures: UCRL-ID-136221 [R]. Office of Scientific and Technical Information (OSTI), 1999.
- [8] CAWKWELL M J, RAMOS K J, HOOKS D E, et al. Homogeneous dislocation nucleation in cyclotrimethylene trinitramine under shock loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 107(6): 063512.
- [9] SHEHADEH M A, BRINGA E M, ZBIB H M, et al. Simulation of shock-induced plasticity including homogeneous and heterogeneous dislocation nucleations [J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 89(17): 171918.
- [10] CERRETA E K, ESCOBEDO J P, RIGG P A, et al. The influence of phase and substructural evolution during dynamic loading on subsequent mechanical properties of zirconium [J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(20): 7712–7719.
- [11] BOURNE N K, MILLETT J C F, CHEN M, et al. On the Hugoniot elastic limit in polycrystalline alumina [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 102(7): 073514.
- [12] MEYERS M A, GREGORI F, KAD B K, et al. Laser-induced shock compression of monocrystalline copper: characterization and analysis [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(5): 1211–1228.
- [13] RAHUL, DE S. A phase-field model for shock-induced α - γ phase transition of RDX [J]. *International Journal of Plasticity*, 2017, 88: 140–158.
- [14] ADESSIO F L, LUSCHER D J, CAWKWELL M J, et al. A single-crystal model for the high-strain rate deformation of cyclotrimethylene trinitramine including phase transformations and plastic slip [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121(18): 185902.
- [15] WINEY J M, GUPTA Y M. Shock wave compression of hexagonal-close-packed metal single crystals: time-dependent, anisotropic elastic-plastic response of beryllium [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 116(3): 033505.
- [16] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Shock waves in polycrystalline iron [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(13): 135701.
- [17] KANEL G I. Spall fracture: methodological aspects, mechanisms and governing factors [J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 163(1/2): 173–191.

- [18] CHEN X, ASAY J R, DWIVEDI S K, et al. Spall behavior of aluminum with varying microstructures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2006, 99(2): 023528.
- [19] ROTERS F, EISENLOHR P, HANTCHERLI L, et al. Overview of constitutive laws, kinematics, homogenization and multiscale methods in crystal plasticity finite-element modeling: theory, experiments, applications [J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(4): 1152–1211.
- [20] 郑松林. 晶体塑性有限元在材料动态响应研究中的应用进展 [J]. *高压物理学报*, 2019, 33(3): 030108.
ZHENG S L. Advances in the study of dynamic response of crystalline materials by crystal plasticity finite element modeling [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2019, 33(3): 030108.
- [21] HILL R, RICE J R. Constitutive analysis of elastic-plastic crystals at arbitrary strain [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1972, 20(6): 401–413.
- [22] ASARO R J. Micromechanics of crystals and polycrystals [M]//*Advances in Applied Mechanics*. Elsevier, 1983: 1–115.
- [23] CLAYTON J D. Dynamic plasticity and fracture in high density polycrystals: constitutive modeling and numerical simulation [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(2): 261–301.
- [24] VOGLER T, CLAYTON J. Heterogeneous deformation and spall of an extruded tungsten alloy: plate impact experiments and crystal plasticity modeling [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(2): 297–335.
- [25] HANSEN B L, BEYERLEIN I J, BRONKHORST C A, et al. A dislocation-based multi-rate single crystal plasticity model [J]. *International Journal of Plasticity*, 2013, 44: 129–146.
- [26] DE S, ZAMIRI A R, RAHUL. A fully anisotropic single crystal model for high strain rate loading conditions with an application to α -RDX [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 64: 287–301.
- [27] SHAHBA A, GHOSH S. Crystal plasticity FE modeling of Ti alloys for a range of strain-rates. Part I : a unified constitutive model and flow rule [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 87: 48–68.
- [28] BELYTSCHKO T, LIU W K, MORAN B, et al. Nonlinear finite elements for continua and structures [M]. John Wiley & Sons, 2013.
- [29] BECKER R. Effects of crystal plasticity on materials loaded at high pressures and strain rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2004, 20(11): 1983–2006.
- [30] PI A G, HUANG F L, WU Y Q, et al. Anisotropic constitutive model and numerical simulations for crystalline energetic material under shock loading [J]. *Mathematics and Mechanics of Solids*, 2014, 19(6): 640–658.
- [31] LUSCHER D J, BRONKHORST C A, ALLEMAN C N, et al. A model for finite-deformation nonlinear thermomechanical response of single crystal copper under shock conditions [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2013, 61(9): 1877–1894.
- [32] LUSCHER D J, MAYEUR J R, MOURAD H M, et al. Coupling continuum dislocation transport with crystal plasticity for application to shock loading conditions [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 76: 111–129.
- [33] DOS SANTOS T, ROSA P A R, MAGHOUS S, et al. A simplified approach to high strain rate effects in cold deformation of polycrystalline FCC metals: constitutive formulation and model calibration [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 82: 76–96.
- [34] STAINIER L, ORTIZ M. Study and validation of a variational theory of thermo-mechanical coupling in finite visco-plasticity [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2010, 47(5): 705–715.
- [35] VON NEUMANN J, RICHTMYER R D. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks [J]. *Journal of Applied Physics*, 1950, 21(3): 232–237.
- [36] VINET P, SMITH J R, FERRANTE J, et al. Temperature effects on the universal equation of state of solids [J]. *Physical Review B*, 1987, 35(4): 1945.
- [37] 李欣竹. 金属物态方程的讨论 [D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2003.
LI X Z. Discussion for the semi-empiric equation of state of metals [D]. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2003.
- [38] CAWKWELL M J, LUSCHER D J, ADDESSIO F L, et al. Equations of state for the α and γ polymorphs of cyclotrimethylene trinitramine [J]. *Journal of Applied Physics*, 2016, 119(18): 185106.
- [39] LUSCHER D J, ADDESSIO F L, CAWKWELL M J, et al. A dislocation density-based continuum model of the anisotropic shock response of single crystal α -cyclotrimethylene trinitramine [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, 98:

- 63–86.
- [40] 尚福林, 王子昆. 塑性力学基础 [M]. 西安: 西安交通大学出版社, 2011.
SHANG F L, WANG Z K. Fundamentals of of plasticity [M]. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2011.
- [41] HUTCHINSON J W. Bounds and self-consistent estimates for creep of polycrystalline materials [J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1976, 348(1652): 101–127.
- [42] LI H W, YANG H, SUN Z C. A robust integration algorithm for implementing rate dependent crystal plasticity into explicit finite element method [J]. *International Journal of Plasticity*, 2008, 24(2): 267–288.
- [43] KHAN A S, LIU J, YOON J W, et al. Strain rate effect of high purity aluminum single crystals: experiments and simulations [J]. *International Journal of Plasticity*, 2015, 67: 39–52.
- [44] ZHANG K, HOPPERSTAD O, HOLMEDAL B, et al. A robust and efficient substepping scheme for the explicit numerical integration of a rate-dependent crystal plasticity model [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2014, 99(4): 239–262.
- [45] LIM H, JONG BONG H, CHEN S R, et al. Developing anisotropic yield models of polycrystalline tantalum using crystal plasticity finite element simulations [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2018, 730: 50–56.
- [46] BOBBILI R, MADHU V. Crystal plasticity modeling of a near alpha titanium alloy under dynamic compression [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 759: 85–92.
- [47] KOCKS U F, ARGON A S, ASHBY M F. Thermodynamics and kinetics of slip [J]. *Progress in Materials Science*, 1975, 19: 141–145.
- [48] LI J F, ROMERO I, SEGURADO J. Development of a thermo-mechanically coupled crystal plasticity modeling framework: application to polycrystalline homogenization [J]. *International Journal of Plasticity*, 2019, 119: 313–330.
- [49] BRONKHORST C A, GRAY G T III, ADDESSIO F L, et al. Publisher's note: "Response and representation of ductile damage under varying shock loading conditions in tantalum" [J. Appl. Phys. 119, 085103(2016)] [J]. *Journal of Applied Physics*, 2016, 119(10): 109901.
- [50] CHANDRA S, SAMAL M K, KAPOOR R, et al. Deformation behavior of Nickel-based superalloy Su-263: experimental characterization and crystal plasticity finite element modeling [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2018, 735: 19–30.
- [51] 王礼立, 胡时胜, 杨黎明. 材料动力学 [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社, 2017.
WANG L L, HU S S, YANG L M. Thermodynamics and kinetics of materials [M]. Hefei: Press of University of Science and Technology of China, 2017.
- [52] MEYERS M A. 材料的动力学行为 [M]. 张庆明, 译. 北京: 国防工业出版社, 2006.
MEYERS M A. Dynamic behavior of materials [M]. Translated by ZHANG Q M. Beijing: National Defense Industry Press, 2006.
- [53] 黄克智, 肖纪美. 材料的损伤断裂机理和宏微观力学理论 [M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
HUANG K Z, XIAO J M. Damage and fracture mechanisms of materials and macro-micro-mechanics [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1999.
- [54] BITTENCOURT E. Dynamic explicit solution for higher-order crystal plasticity theories [J]. *International Journal of Plasticity*, 2014, 53: 1–16.
- [55] PEIRCE D, ASARO R J, NEEDLEMAN A. An analysis of nonuniform and localized deformation in ductile single crystals [J]. *Acta Metallurgica*, 1982, 30(6): 1087–1119.
- [56] ACHARYA A, BEAUDOIN A J. Grain-size effect in viscoplastic polycrystals at moderate strains [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2000, 48(10): 2213–2230.
- [57] CLAYTON J D. Modeling dynamic plasticity and spall fracture in high density polycrystalline alloys [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2005, 42(16/17): 4613–4640.
- [58] CLAYTON J D. Plasticity and spall in high density polycrystals: modeling and simulation [C]//AIP Conference Proceedings, Baltimore, Maryland (USA). AIP, 2006.
- [59] TAJALLI S A, MOVAHHEDI M R, AKBARI J. Simulation of orthogonal micro-cutting of FCC materials based on rate-dependent crystal plasticity finite element model [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 86: 79–87.
- [60] LI J G, LI Y L, HUANG C X, et al. On adiabatic shear localization in nanostructured face-centered cubic alloys with different stacking fault energies [J]. *Acta Materialia*, 2017, 141: 163–182.

- [61] LI J G, LI Y L, SUO T, et al. Numerical simulations of adiabatic shear localization in textured FCC metal based on crystal plasticity finite element method [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2018, 737: 348–363.
- [62] JOHNSTON W G, GILMAN J J. Dislocation velocities, dislocation densities, and plastic flow in lithium fluoride crystals [J]. *Journal of Applied Physics*, 1959, 30(2): 129–144.
- [63] GILMAN J J. The plastic resistance of crystals [J]. *Australian Journal of Physics*, 1960, 13(2): 327.
- [64] GILMAN J J. *Micromechanics of flow in solids* [M]. McGraw-Hill, 1969.
- [65] JOHNSON J N, BARKER L M. Dislocation dynamics and steady plastic wave profiles in 6061-T6 aluminum [J]. *Journal of Applied Physics*, 1969, 40(11): 4321–4334.
- [66] ALANKAR A, EISENLOHR P, RAABE D. A dislocation density-based crystal plasticity constitutive model for prismatic slip in α -titanium [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(18): 7003–7009.
- [67] ZHANG H M, DONG X H, DU D P, et al. A unified physically based crystal plasticity model for FCC metals over a wide range of temperatures and strain rates [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2013, 564: 431–441.
- [68] MONNET G, VINCENT L, DEVINCERE B. Dislocation-dynamics based crystal plasticity law for the low- and high-temperature deformation regimes of bcc crystal [J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(16): 6178–6190.
- [69] NGUYEN T, LUSCHER D J, WILKERSON J W. A dislocation-based crystal plasticity framework for dynamic ductile failure of single crystals [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2017, 108: 1–29.
- [70] GRILLI N, JANSSENS K G F, NELLESSEN J, et al. Multiple slip dislocation patterning in a dislocation-based crystal plasticity finite element method [J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 100: 104–121.
- [71] FROST H J, ASHBY M F. Motion of a dislocation acted on by a viscous drag through an array of discrete obstacles [J]. *Journal of Applied Physics*, 1971, 42(13): 5273–5279.
- [72] LIM H, BATTAILLE C C, CARROLL J D, et al. A physically based model of temperature and strain rate dependent yield in BCC metals: implementation into crystal plasticity [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2015, 74: 80–96.
- [73] KOCKS W. Thermodynamics and kinetics of slip [J]. *Progress in Materials Science*, 1975, 19: 1–281.
- [74] AUSTIN R A. Elastic precursor wave decay in shock-compressed aluminum over a wide range of temperature [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 123(3): 035103.
- [75] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of fcc metals at very high strain rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2011, 27(1): 1–24.
- [76] AUSTIN R A, MCDOWELL D L. Parameterization of a rate-dependent model of shock-induced plasticity for copper, nickel, and aluminum [J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 32/33: 134–154.
- [77] GAO C Y, ZHANG L C. Constitutive modelling of plasticity of fcc metals under extremely high strain rates [J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 32/33: 121–133.
- [78] WANG Z Q, BEYERLEIN I J, LESAR R. Slip band formation and mobile dislocation density generation in high rate deformation of single fcc crystals [J]. *Philosophical Magazine*, 2008, 88(9): 1321–1343.
- [79] TSCHOPP M A, MCDOWELL D L. Influence of single crystal orientation on homogeneous dislocation nucleation under uniaxial loading [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(5): 1806–1830.
- [80] SHEHADEH M A, ZBIB H M. On the homogeneous nucleation and propagation of dislocations under shock compression [J]. *Philosophical Magazine*, 2016, 96(26): 2752–2778.
- [81] MA A, ROTERS F, RAABE D. A dislocation density based constitutive model for crystal plasticity FEM including geometrically necessary dislocations [J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(8): 2169–2179.
- [82] MA A, ROTERS F. A constitutive model for fcc single crystals based on dislocation densities and its application to uniaxial compression of aluminium single crystals [J]. *Acta Materialia*, 2004, 52(12): 3603–3612.
- [83] LLOYD J T, CLAYTON J D, AUSTIN R A, et al. Plane wave simulation of elastic-viscoplastic single crystals [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2014, 69: 14–32.
- [84] ALANKAR A, FIELD D P, ZBIB H M. Explicit incorporation of cross-slip in a dislocation density-based crystal plasticity model [J]. *Philosophical Magazine*, 2012, 92(24): 3084–3100.
- [85] KESHAVARZ S, GHOSH S. Multi-scale crystal plasticity finite element model approach to modeling nickel-based superalloys [J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(17): 6549–6561.
- [86] LIANG H, DUNNE F P E. GND accumulation in bi-crystal deformation: crystal plasticity analysis and comparison with

- experiments [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2009, 51(4): 326–333.
- [87] GÜVENÇ O, BAMBACH M, HIRT G. Coupling of crystal plasticity finite element and phase field methods for the prediction of SRX kinetics after hot working [J]. *Steel Research International*, 2014, 85(6): 999–1009.
- [88] KONDO R, TADANO Y, SHIZAWA K. A phase-field model of twinning and detwinning coupled with dislocation-based crystal plasticity for HCP metals [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95: 672–683.
- [89] CHEN L, CHEN J, LEBENSOHN R A, et al. An integrated fast Fourier transform-based phase-field and crystal plasticity approach to model recrystallization of three dimensional polycrystals [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 285: 829–848.
- [90] COTTURA M, APPOLAIRE B, FINEL A, et al. Coupling the phase field method for diffusive transformations with dislocation density-based crystal plasticity: application to Ni-based superalloys [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2016, 94: 473–489.
- [91] PARANJPE H M, MANCHIRAJU S, ANDERSON P M. A phase field: finite element approach to model the interaction between phase transformations and plasticity in shape memory alloys [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 80: 1–18.
- [92] IDESMAN A V, LEVITAS V I, STEIN E. Elastoplastic materials with martensitic phase transition and twinning at finite strains: numerical solution with the finite element method [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 1999, 173(1/2): 71–98.
- [93] HUANG M, BRINSON L C. A Multivariant model for single crystal shape memory alloy behavior [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46(8): 1379–1409.
- [94] BHATTACHARYYA A, WENG G J. An energy criterion for the stress-induced martensitic transformation in a ductile system [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1994, 42(11): 1699–1724.
- [95] STRINGFELLOW R G, PARKS D M, OLSON G B. A constitutive model for transformation plasticity accompanying strain-induced martensitic transformations in metastable austenitic steels [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1992, 40(7): 1703–1716.
- [96] LEBLOND J B, MOTTET G, DEVAUX J C. A theoretical and numerical approach to the plastic behaviour of steels during phase transformations: I. derivation of general relations [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1986, 34(4): 395–409.
- [97] THAMBURAJA P, ANAND L. Polycrystalline shape-memory materials: effect of crystallographic texture [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(4): 709–737.
- [98] MA A X, HARTMAIER A. A study of deformation and phase transformation coupling for TRIP-assisted steels [J]. *International Journal of Plasticity*, 2015, 64: 40–55.
- [99] SUN C Y, GUO N, FU M W, et al. Modeling of slip, twinning and transformation induced plastic deformation for TWIP steel based on crystal plasticity [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 76: 186–212.
- [100] LEE M G, KIM S J, HAN H N. Crystal plasticity finite element modeling of mechanically induced martensitic transformation (MIMT) in metastable austenite [J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(5): 688–710.
- [101] TURTELTAUB S, SUIKER A S J. Transformation-induced plasticity in ferrous alloys [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(8): 1747–1788.
- [102] TURTELTAUB S, SUIKER A S J. A multiscale thermomechanical model for cubic to tetragonal martensitic phase transformations [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2006, 43(14/15): 4509–4545.
- [103] SUIKER A S J, TURTELTAUB S. Computational modelling of plasticity induced by martensitic phase transformations [J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2005, 63(12): 1655–1693.
- [104] MANCHIRAJU S, ANDERSON P M. Coupling between martensitic phase transformations and plasticity: a microstructure-based finite element model [J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(10): 1508–1526.
- [105] FENG B, BRONKHORST C A, ADDESSIO F L, et al. Coupled elasticity, plastic slip, and twinning in single crystal titanium loaded by split-Hopkinson pressure bar [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 119: 274–297.
- [106] GREEFF C W. Alpha-omega transition in Ti: equation of state and kinetics [C]//AIP Conference Proceedings. Atlanta, Georgia (USA). AIP, 2002: 225–228.
- [107] TJAHJANTO D D, TURTELTAUB S, SUIKER A S J. Crystallographically based model for transformation-induced plasticity in multiphase carbon steels [J]. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, 2008, 19(7): 399–422.

- [108] THAMBURAJA P. A finite-deformation-based phenomenological theory for shape-memory alloys [J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(8): 1195–1219.
- [109] THAMBURAJA P, PAN H, CHAU F S. Martensitic reorientation and shape-memory effect in initially textured polycrystalline Ti-Ni sheet [J]. *Acta Materialia*, 2005, 53(14): 3821–3831.
- [110] THAMBURAJA P. Constitutive equations for martensitic reorientation and detwinning in shape-memory alloys [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, 53(4): 825–856.
- [111] BARTON N R, BENSON D J, BECKER R. Crystal level continuum modelling of phase transformations: the $\alpha \leftrightarrow \epsilon$ transformation in iron [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2005, 13(5): 707–731.
- [112] AMOUZOU K E K, RICHTON T, ROTH A, et al. Micromechanical modeling of hardening mechanisms in commercially pure α -titanium in tensile condition [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 80: 222–240.
- [113] GURAO N P, KAPOOR R, SUWAS S. Deformation behaviour of commercially pure titanium at extreme strain rates [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(9): 3431–3446.
- [114] MEREDITH C S, LLOYD J T, SANO T. The quasi-static and dynamic response of fine-grained Mg alloy AMX602: an experimental and computational study [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2016, 673: 73–82.
- [115] ROHATGI A, VECCHIO K S. The variation of dislocation density as a function of the stacking fault energy in shock-deformed FCC materials [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2002, 328(1/2): 256–266.
- [116] KALIDINDI S R. Incorporation of deformation twinning in crystal plasticity models [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1998, 46(2): 267–290.
- [117] CLAYTON J D. Nonlinear elastic and inelastic models for shock compression of crystalline solids [M]. Cham: Springer International Publishing, 2019.
- [118] CLAYTON J. A continuum description of nonlinear elasticity, slip and twinning, with application to sapphire [J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2009, 465(2101): 307–334.
- [119] SALEM A A, KALIDINDI S R, DOHERTY R D, et al. Strain hardening due to deformation twinning in α -titanium: mechanisms [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2006, 37(1): 259–268.
- [120] SALEM A A, KALIDINDI S R, SEMIATIN S L. Strain hardening due to deformation twinning in α -titanium: constitutive relations and crystal-plasticity modeling [J]. *Acta Materialia*, 2005, 53(12): 3495–3502.
- [121] KALIDINDI S R. A crystal plasticity framework for deformation twinning [M]//Continuum Scale Simulation of Engineering Materials. Weinheim, FRG: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005: 543–560.
- [122] ARDELJAN M, BEYERLEIN I J, MCWILLIAMS B A, et al. Strain rate and temperature sensitive multi-level crystal plasticity model for large plastic deformation behavior: application to AZ31 magnesium alloy [J]. *International Journal of Plasticity*, 2016, 83: 90–109.
- [123] ARDELJAN M, MCCABE R J, BEYERLEIN I J, et al. Explicit incorporation of deformation twins into crystal plasticity finite element models [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2015, 295: 396–413.
- [124] BEYERLEIN I J, TOMÉ C N. A dislocation-based constitutive law for pure Zr including temperature effects [J]. *International Journal of Plasticity*, 2008, 24(5): 867–895.
- [125] MADEC R, DEVINCRE B, KUBIN L P. From dislocation junctions to forest hardening [J]. *Physical Review Letters*, 2002, 89(25): 255508.
- [126] SONG S G, GRAY G T III. Structural interpretation of the nucleation and growth of deformation twins in Zr and Ti: I. application of the coincidence site lattice (CSL) theory to twinning problems in hcp structures [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1995, 43(6): 2325–2337.
- [127] SONG S G, GRAY G T III. Structural interpretation of the nucleation and growth of deformation twins in Zr and Ti: II. TEM study of twin morphology and defect reactions during twinning [J]. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1995, 43(6): 2339–2350.
- [128] SONG S G, GRAY G T. Influence of temperature and strain rate on slip and twinning behavior of Zr [J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 1995, 26(10): 2665–2675.
- [129] 朱兆祥, 李永池, 王肖钧. 爆炸作用下钢板层裂的数值分析 [J]. *应用数学和力学*, 1981, 2(4): 353–368.
ZHU Z X, LI Y C, WANG X J. Numerical analysis of the spallation of steel target under the explosive loading [J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 1981, 2(4): 353–368.
- [130] RINEHART J S. Some quantitative data bearing on the scabbing of metals under explosive attack [J]. *Journal of Applied*

- [Physics](#), 1951, 22(5): 555–560.
- [131] ZHANG K S, ZHANG D, FENG R, et al. Microdamage in polycrystalline ceramics under dynamic compression and tension [J]. [Journal of Applied Physics](#), 2005, 98(2): 023505.
- [132] LLOYD J T, MATEJUNAS A J, BECKER R, et al. Dynamic tensile failure of rolled magnesium: simulations and experiments quantifying the role of texture and second-phase particles [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2019, 114: 174–195.
- [133] LING C, BESSON J, FOREST S, et al. An elastoviscoplastic model for porous single crystals at finite strains and its assessment based on unit cell simulations [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2016, 84: 58–87.
- [134] NGUYEN T, LUSCHER D J, WILKERSON J W. A dislocation-based crystal plasticity framework for dynamic ductile failure of single crystals [J]. [Journal of the Mechanics and Physics of Solids](#), 2017, 108: 1–29.
- [135] NGUYEN T, LUSCHER D J, WILKERSON J W. The role of elastic and plastic anisotropy in intergranular spall failure [J]. [Acta Materialia](#), 2019, 168: 1–12.
- [136] BAI Y L, DODD B. Adiabatic shear localization: occurrence, theories, and applications [M]. Oxford: Pergamon Press, 1992.
- [137] DODD B, BAI Y L. Adiabatic shear localization: frontiers and advances [M]. Elsevier, 2012.
- [138] ZENER C, HOLLOMON J H. Effect of strain rate upon plastic flow of steel [J]. [Journal of Applied Physics](#), 1944, 15(1): 22–32.
- [139] HINES J A, VECCHIO K S, AHZI S. A model for microstructure evolution in adiabatic shear bands [J]. [Metallurgical and Materials Transactions A](#), 1998, 29(1): 191–203.
- [140] LEE W B, WANG H, CHAN C Y, et al. Finite element modelling of shear angle and cutting force variation induced by material anisotropy in ultra-precision diamond turning [J]. [International Journal of Machine Tools and Manufacture](#), 2013, 75: 82–86.
- [141] BRONKHORST C A, HANSEN B L, CERRETA E K, et al. Modeling the microstructural evolution of metallic polycrystalline materials under localization conditions [J]. [Journal of the Mechanics and Physics of Solids](#), 2007, 55(11): 2351–2383.
- [142] WRIGHT T W. 绝热剪切带的数理分析 [M]. 李云凯, 孙川, 王云飞, 译. 北京: 北京理工大学出版社, 2013.
WRIGHT T W. The physics and mathematics of adiabatic shear bands [M]. Translated by LI Y K, SUN C, WANG Y F. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 2003.
- [143] BARGMANN S, EKH M. Microscopic temperature field prediction during adiabatic loading using gradient extended crystal plasticity [J]. [International Journal of Solids and Structures](#), 2013, 50(6): 899–906.
- [144] CULVER R S. Thermal instability strain in dynamic plastic deformation [M]//Metallurgical Effects at High Strain Rates. Boston: Springer, 1973: 519–530.
- [145] BAI Y L. A criterion for thermo-plastic shear instability [M]//Shock Waves and High-Strain-Rate Phenomena in Metals. Boston: Springer, 1981: 277–284.
- [146] SCHOENFELD S E, WRIGHT T W. A failure criterion based on material instability [J]. [International Journal of Solids and Structures](#), 2003, 40(12): 3021–3037.
- [147] ZHANG Z, EAKINS D E, DUNNE F P E. On the formation of adiabatic shear bands in textured HCP polycrystals [J]. [International Journal of Plasticity](#), 2016, 79: 196–216.
- [148] RECHT R F. Catastrophic thermoplastic shear [J]. [Journal of Applied Mechanics](#), 1964, 31(2): 189–193.
- [149] DUSZEK-PERZYNA M K, PERZYNA P. Analysis of the influence of non-schmid and thermal effects on adiabatic shear band localization in elastic-plastic single crystals [M]//Finite Inelastic Deformations: Theory and Applications. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1992: 155–165.
- [150] DUSZEK-PERZYNA M K, PERZYNA P. Adiabatic shear band localization in elastic-plastic single crystals [J]. [International Journal of Solids and Structures](#), 1993, 30(1): 61–89.
- [151] DUSZEK-PERZYNA M K, PERZYNA P. Adiabatic shear band localization of inelastic single crystals in symmetric double-slip process [J]. [Archive of Applied Mechanics](#), 1996, 66(6): 369.
- [152] RITTEL D, WANG Z G, MERZER M. Adiabatic shear failure and dynamic stored energy of cold work [J]. [Physical Review Letters](#), 2006, 96(7): 075502.
- [153] BOUBAKER H B, MAREAU C, AYED Y, et al. Development of a hyperelastic constitutive model based on the crystal plasticity theory for the simulation of machining operations [J]. [Procedia CIRP](#), 2019, 82: 20–25.

附录 A 符号说明

本文所涉及的物理量很多, 为便于阅读, 将部分量的符号予以特别说明, 见表 A1、表 A2、表 A3、表 A4 和表 A5。

表 A1 运动学符号说明

Table A1 Symbol description of kinematics

Symbols	Description
$\mathbf{F}(\mathbf{F}^e, \mathbf{F}^p, \mathbf{F}^\theta)$	Deformation gradient including elastic, plastic and thermal components
$\mathbf{L}(\mathbf{L}^e, \mathbf{L}^p, \mathbf{L}^\theta)$	Velocity gradient including elastic, plastic and thermal components
$\mathbf{R}^e$	Rotation tensor
$\mathbf{U}^e$	Right stretch tensor
α	Thermal expansion coefficient tensor

表 A2 热力学符号说明

Table A2 Symbol description of thermodynamics

Symbols	Description	Symbols	Description
D_{int}	Intrinsic dissipation of the system	K_0	Bulk modulus at zero pressure
ψ	Helmholtz free energy	K'	Pressure derivative of bulk modulus
s	Entropy of the system	T_D	Debye temperature
T	Temperature	R	Molar gas constant
K_T	Isothermal bulk modulus	M_{mol}	Molar mass of the material
c_V	Heat capacity at constant volume	k_B	Boltzmann constant
Γ	Grüneisen coefficient	X_{TN}	Variables related to the lattice thermal vibration
q_n	Internal variables for microscopic defects such as dislocations in materials	X_{TE}	Variables related to the electron activation

表 A3 塑性本构符号说明

Table A3 Symbol description of plastic constitution

Symbols	Description	Symbols	Description
λ^α	Mean spacing between obstacles	ρ_{for}^α	Forest dislocation density
τ^α	Resolved shear stress	t_{r}^α	The drag-dominated mean transit time between obstacles
Q^α	Activation energy	B	Viscous drag coefficient
g^α	Slip resistance	$\dot{\rho}_{\text{nuc}}^\alpha$	The nucleation rate
g_{ath}^α	Athermal slip resistance	$\dot{\rho}_{\text{hom}}^\alpha$	The homogeneous nucleation rate
$h_{\alpha\beta}$	Hardening coefficient	$\dot{\rho}_{\text{het}}^\alpha$	The heterogeneous nucleation rate
ρ^α	Total dislocation density	$\dot{\rho}_{\text{mult}}^\alpha$	The multiplication rate
ρ_{m}^α	Mobile dislocation density	$\dot{\rho}_{\text{trap}}^\alpha$	The trapping rate
ρ_{i}^α	Immobile dislocation density	$\dot{\rho}_{\text{ann}}^\alpha$	The annihilation rate
b^α	Burgers vector	d_{a}	Capture distance of annihilation
v^α	Velocity of mobile dislocations	t_{w}^α	The thermal activation-dominated waiting time at a barrier
$\dot{\gamma}^\alpha$	Slip rate on slip system α		

表 A4 超弹性本构符号说明
Table A4 Symbol description of hyper-elastic constitution

Symbols	Description	Symbols	Description
I	Second-order unit tensor	$\widehat{E}^e$	Isochoric strain in expanded configuration
E^e	Elastic Green–Lagrange strain	$\widehat{\widehat{E}}^e$	Isochoric strain in configuration I
C^e	Elastic right Cauchy–Green tensor	$\overline{E}^e$	Volumetric strain in configuration I
$\widehat{F}^e$	Isochoric part of elastic deformation	S	Second Piola–Kirchhoff stress
$\overline{F}^e$	Volumetric expansion		

表 A5 相变、孪晶与动态破坏符号说明
Table A5 Symbol description of phase transformation, twinning and damage

Symbols	Description	Symbols	Description
F^tr	Deformation gradient of phase transformation	S_{tw}^β	Twin resistance of twin system
v_p	Volume fraction of the parent phase	ρ_{deb}	Dislocation debris density
v_t	Volume fraction of the new phase t	d_{mfp}	Dislocation mean free path related to the volume fraction of twin
v_N	Volume fraction of all new phases	φ	Void volume fraction
f_t	Driving force of phase transformation	F^d	Volumetric part of plastic deformation gradient in porous crystal plastic model
f^β	Volume fraction of twin	Y_r	Resistance of damage evolution
γ_{tw}	Characteristic shear strain of twinning		

Crystal Plasticity Finite Element Theoretical Models and Applications for High Temperature, High Pressure and High Strain-Rate Dynamic Process

LIU Jingnan, YE Changqing, LIU Guisen, SHEN Yao

(School of Material Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: For shock deformation behavior of materials under high temperature, high pressure and high strain-rate loading conditions, dynamic crystal plasticity models can directly reflect the anisotropy of plastic slip and its dependence of temperature, pressure and microstructure in crystals. In consequence, dynamic crystal plasticity models are widely used in simulations of material impact dynamic response, microstructure evolution and dynamic damage. Theoretical models of dynamic crystal plasticity under high pressure shock loading conditions were reviewed in this paper, mainly including: deformation kinetics, hyperelastic constitutive models incorporating equations of state, and crystal plasticity constitutive models. This paper also covers plastic deformation mechanisms, including dislocation slip, phase transition and twinning; as well as dynamic damage, including spalling and adiabatic shear band.

Keywords: dynamic crystal plasticity finite element method; dynamic response; microstructural evolution

基于八面体理论的岩石循环加-卸载本构模型及修正

罗吉安¹, 刘丰茂², 刘之喜², 马雷鸣², 陈烨开², 李欣慰²

(1. 安徽理工大学力学与光电物理学院, 安徽 淮南 232001;

2. 安徽理工大学土木建筑学院, 安徽 淮南 232001)

摘要: 探究岩石的受力特点及破坏特性是研究岩石地下工程安全性的关键, 诸多学者都期望能在岩石本构模型的研究上取得突破性进展。在此背景下, 提出了一种能够描述循环加-卸载条件下岩石的本构模型。首先, 假设岩石的微元强度服从八面体剪应力理论并且微元破坏服从 Weibull 概率公式, 将岩石本构中的损伤变量以及岩石微元强度表达式里包含的损伤因子进行本构变换, 得到关于应力、应变等其他表现加-卸载下岩石损伤本构模型的参数, 表示出岩石微元强度和损伤变量, 再将得到的岩石微元强度和损伤变量代入所提出的岩石本构模型中, 并进行等式变换得到一个函数表达式。通过将其与实验数据进行拟合对比分析, 得出修正后的拟合参数, 将其代入函数式中, 得到损伤本构模型的修正式。最后将拟合参数进行必要的敏感性分析, 得出各拟合参数的实际物理意义。

关键词: 循环加-卸载; 本构模型; 八面体剪应力理论; 岩石

中图分类号: O347.3; TU457

文献标识码: A

岩石地下工程与人们的生命安全息息相关, 如隧道、地下井巷等, 主要原因是当岩石开挖后, 周围岩石失去原有的平衡状态, 内部的应力场也会发生变化。另外, 岩石地下工程难免受到周期加-卸载作用, 如地面交通周期荷载、地震等。众多学者对周期荷载作用下的岩石性质展开了研究, 但却较少涉及循环加-卸载作用下岩石的本构模型。因此, 将循环加-卸载作用引入岩石本构模型的研究中, 为岩石损伤本构模型研究提供新的思路。

岩石本构模型研究一直是岩石力学的重中之重, 虽然现有的岩石本构模型比较多, 但是往往存在许多问题, 难以反映实际情况。因此, 基于徐志英^[1]、刘佑荣^[2]等的岩石、岩体破坏理论, 研究人员从不同方向对岩石损伤本构模型进行了探讨。曹文贵等^[3-5]将岩石损伤本构理论与统计学理论有机地结合起来, 利用岩石微元强度服从 Weibull 随机分布的特点, 建立了岩石破裂全过程的损伤本构模型。在此基础上, 袁小平等^[6]将 Drucker-Prager 准则很好地运用到岩石弹塑性损伤本构模型的研究中, 建立了 Drucker-Prager 准则下的岩石损伤本构模型。李西蒙等^[7]分析了分级循环加-卸载应力-应变曲线特征和分级循环加-卸载下岩石疲劳损伤演化过程, 建立了循环加-卸载条件下轴向应变与循环数目之间的理论模型。王者超等^[8]通过花岗岩三轴循环试验, 系统地研究了花岗岩疲劳力学特性, 并提出了其疲劳力学模型。此外, 何明明等^[9]研究了循环加载过程变形 3 阶段的变形特性、循环软化与循环硬化、能耗特征, 并且建立了耗散能随循环次数变化的演化方程。张平等^[10-11]通过预测压气储能洞室

* 收稿日期: 2019-06-26; 修回日期: 2019-07-10

基金项目: 国家自然科学基金(51404013); 安徽高校自然科学基金重大项目(KJ2018ZD010); 深部岩土力学与地下工程国家重点实验室开放基金(SKLGDUK1212)

作者简介: 罗吉安(1978—), 男, 博士, 副教授, 主要从事矿山工程力学的理论与应用研究。

E-mail: 19552433@qq.com

通信作者: 刘丰茂(1995—), 男, 硕士研究生, 主要从事岩石蠕变与损伤本构研究。

E-mail: liufmaust@163.com

的长期稳定性,提出了一种能够描述岩石循环加-卸载的本构关系,使岩石损伤本构模型研究取得了重大进展。

基于以上研究背景,本工作将基于 Weibull 随机分布特点的岩石损伤本构模型进行拓展,引入八面体剪应力理论,并假设岩石微元强度服从八面体剪应力理论并且微元破坏服从 Weibull 概率公式,通过加-卸载循环试验,描述每个循环内岩石强度及加-卸载模量的变化,进而提出循环加-卸载岩石损伤本构模型;进一步通过岩石损伤本构公式变换,得到关于应力、应变、泊松比、弹性模量以及其他能够表现加-卸载下岩石损伤本构模型的实验参数,将所采用的八面体剪应力理论以及各实验参数代入本构模型中,从而得到岩石的本构数学模型,并对单轴循环加-卸载作用下的岩石材料试验进行数据拟合,进一步分析所提出的岩石损伤本构模型以及各试验参数的物理意义。

1 岩石本构模型

1.1 本构模型的建立

根据岩石在变形前后应变等价的原则,即利用 J. Lemaitre 应变等价假说,建立岩石损伤本构关系

$$\sigma^* = \sigma / (1 - D) = E \varepsilon^e / (1 - D) \quad (1)$$

式中: σ^* 为有效应力矩阵, σ 为名义应力矩阵, E 为岩石材料弹性矩阵, ε^e 为岩石弹性应变矩阵, D 为岩石损伤变量。对于以上建立的岩石损伤本构模型,损伤变量的确定是其关键,但是由于损伤变量的影响因素极为复杂,并且无法直接从试验中准确地获得,所以本研究结合岩石的破坏模型与判断依据,引入岩石微元强度和岩石破坏服从 Weibull 概率公式的特点,提出了基于八面体剪应力理论表示岩石损伤变量的方法。基于徐卫亚等^[12]采用的方法,即假定岩石的破坏准则通式为

$$f(\sigma^*) - k_0 = 0 \quad (2)$$

式中: k_0 是表示与材料黏聚力和内摩擦角有关的常数。式(2)虽然能够非常直观地表现出岩石微元强度的破坏情况,但却不能清楚地表现宏观状态下岩石破坏的程度,因此如何用岩石的微元强度表示宏观岩石强度将成为解决问题的关键。岩石内部由无数微元组成,两者是整体与个体的关系,故可引入概率统计学说,设岩石微元破坏的概率为 $P[f(\sigma^*)] = P[k_0]$, 依据概率统计理论,损伤变量的破坏概率为

$$D = \int_0^{k_0} P(x) dx \quad (3)$$

1.2 岩石微元强度确定

岩石微元强度实际上决定了宏观条件下岩石破坏的危险程度,因此,选择何种强度准则或者理论来近似定义岩石微元强度将是岩石损伤本构模型建立的关键。目前,用 Drucker-Prager 破坏准则、Coulomb-Mohr 准则、莫尔库伦强度准则等定义岩石的微元强度,都取得了不错的研究进展。然而,有些岩石在两向或三向受力情况下,破坏之前的变形较大,没有明显的破坏荷载,表现出显著的塑性变形、流动或挤出,这种破坏即为塑性破坏。对于这类岩石,八面体剪应力理论认为,当八面体剪应力达到材料危险状态时的八面体剪应力值时,材料将处于危险状态,该理论更适用于复杂状态下的塑性材料,故八面体剪应力理论适用于定义某些复杂状态下岩石的微元强度。任何应力状态下的八面体剪应力理论可表示为

$$\tau_{oct} = \frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2} \quad (4)$$

式中: σ_1 、 σ_2 、 σ_3 分别为 3 个主应力。故基于八面体剪应力理论下岩石的微元强度为

$$F = \frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_1^* - \sigma_2^*)^2 + (\sigma_2^* - \sigma_3^*)^2 + (\sigma_3^* - \sigma_1^*)^2} \quad (5)$$

式中: σ_1^* 、 σ_2^* 、 σ_3^* 为损伤变量修正后的有效主应力。

1.3 三轴作用下岩石本构关系的建立

假设岩石为各向同性体, 并且其破坏时岩石的微元强度服从 Weibull 概率分布, 则岩石的概率密度分布函数为

$$P(F) = (m/F_0)(F/F_0)^{m-1} \exp[-(F/F_0)^m] \quad (6)$$

式中: F 为微元破坏 Weibull 分布的分布变量, m 和 F_0 为 Weibull 的分布参数。基于统计学理论, 将式(6)代入式(3), 变换整理后可得损伤变量为

$$D = \int_0^F P(x) dx = 1 - \exp[-(F/F_0)^m] \quad (7)$$

上述岩石损伤变量求解的关键在于岩石微元强度的确定, 本研究将八面体剪应力理论近似表示岩石的微元强度, 故将式(5)代入式(7)得出岩石损伤变量的最终表达式

$$D = \int_0^F P(x) dx = 1 - \exp\left[-\left(\frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_1^* - \sigma_2^*)^2 + (\sigma_2^* - \sigma_3^*)^2 + (\sigma_3^* - \sigma_1^*)^2} / F_0\right)^m\right] \quad (8)$$

损伤力学中 J. Lemaitre 应变等价假说以及材料力学中广义胡克定律可表示为

$$\sigma^* = \sigma / (1 - D) \quad (9)$$

$$\varepsilon = \frac{1}{E} [\sigma_1^* - \mu(\sigma_2^* + \sigma_3^*)] \quad (10)$$

式中: E 为弹性模量, μ 为泊松比。联立式(8)、式(9)、式(10), 可得岩石在三轴作用下的损伤关系

$$\sigma_1 = [E\varepsilon_1 + \mu(\sigma_2^* + \sigma_3^*)] \exp\left[-\left(\frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_1^* - \sigma_2^*)^2 + (\sigma_2^* - \sigma_3^*)^2 + (\sigma_3^* - \sigma_1^*)^2} / F_0\right)^m\right] \quad (11)$$

所以, 岩石在三轴作用下的损伤本构模型可表示为

$$\sigma_1 = E\varepsilon_1 (1 - D) + \mu(\sigma_2 + \sigma_3) \quad (12)$$

或

$$\sigma_1 = E\varepsilon_1 \exp\left[-\left(\frac{1}{3} \sqrt{(\sigma_1^* - \sigma_2^*)^2 + (\sigma_2^* - \sigma_3^*)^2 + (\sigma_3^* - \sigma_1^*)^2} / F_0\right)^m\right] + \mu(\sigma_2 + \sigma_3) \quad (13)$$

1.4 单轴作用下岩石本构关系的建立

当岩石材料处于单轴状态下时, 仅受到单方向的力, 故将三轴作用下岩石本构关系进行公式变换, 即可得到单轴作用下岩石本构模型

$$\sigma = E\varepsilon \exp\left[-(\sqrt{2}(1 - \mu)E\varepsilon/3F_0)^m\right] \quad (14)$$

2 试验过程及数据分析

基于章清叙等^[13]周期荷载作用下红砂岩变形特性的试验方法, 本研究通过对砂岩的循环加-卸载试验(见图 1)来验证提出的岩石本构关系。选取直径为 50 mm、高为 100 mm 的标准岩石试件(见图 2), 并且要求砂岩试件两端不平行度误差不大于 0.05 mm。对每个试件都进行 6 个等级的加-卸载, 加载卸载过程不间断, 每次加载的峰值大约为 30、40、50、60、70、80 MPa, 当加载到第 6 等级时, 岩石自动急剧卸载, 岩石破坏。砂岩的循环加-卸载应力-应变曲线如图 3 所示。

从实验数据中可以看出, 岩石在循环加-卸载试验过程中存在残余变形, 并且第一次卸载时最大, 达到 0.12, 这是由于自然界岩石材料中存在诸多缝隙、空隙等, 在加载过程中, 这些空隙不断被压密, 形成了无法逆转的塑性变形, 这也符合葛修润等^[14-15]提出的岩石疲劳破坏和不可逆变形问题的结论。经过多次反复加载与卸载, 且每次施加的峰值荷载都比前一次施加的峰值荷载大, 塑性滞回环的面积也



图 1 循环加-卸载试验机

Fig. 1 Cyclic loading and unloading test machine



图 2 标准岩石试件

Fig. 2 Standard rock specimens

将有所扩充,岩石的弹性模量也有所增加,因此,结合岩石力学中砂岩弹性模量的经验取值,可将砂岩的弹性模量取值为 12 GPa。另外,由应力-应变曲线也可以看出,经过最后一个等级加载后,岩石急剧卸载,这是由于岩石在承受大约 82 MPa 后发生破坏,破坏后岩石无法再承受应力,所以,应力将急剧下降,直至为零。

3 参数拟合及本构修正

3.1 拟合公式的变换

目前,对于 Weibull 分布下的岩石损伤本构模型数据拟合过程,大部分采取在本构模型的基础上引进经验公式,进而推导出关于 m 和 F_0 的函数表达式。此种方法虽然可以拟合出 m 和 F_0 ,但形式过于复杂。本研究通过系列等式变换,将所提出的本构模型变换为较简单的关于 m 和 F_0 的数学表达式,再进行拟合,即可得到所需要的参数。首先,将式(14)进行变换,可得

$$\sigma/E\varepsilon = \exp\left[-(\sqrt{2}(1-\mu)E\varepsilon/3F_0)^m\right] \quad (15)$$

再进一步变换,得

$$\ln(\sigma/E\varepsilon) = -[\sqrt{2}(1-\mu)E\varepsilon/3F_0]^m \quad (16)$$

故

$$F_0[-\ln(\sigma/E\varepsilon)]^{\frac{1}{m}} = \sqrt{2}(1-\mu)E\varepsilon/3 \quad (17)$$

令 $A = -\ln(\sigma/E\varepsilon)$, $B = \sqrt{2}(1-\mu)E\varepsilon/3 \approx 0.47E\varepsilon - 0.47E\varepsilon\mu$, $n = \frac{1}{m}$, 可得出本构变换方程为

$$B = F_0 A^n \quad (18)$$

3.2 拟合数据的处理及分析

本研究采用单轴循环加-卸载试验对所提出的岩石本构关系进行验证。首先,对所选试件进行分等级加-卸载试验,并根据实验数据对所有循环下的实验曲线进行拟合,然后选取试验曲线拟合程度较好的典型试验结果曲线(见图 4、图 5),再进行整理分析。

对实验数据进行拟合处理后,便可分别得到加载阶段曲线和卸载阶段曲线,由加-卸载曲线可知:实验数据拟合曲线的拟合校正系数均在 0.98 以上(第 1 等级加载除外),说明拟合效果非常好。另外,

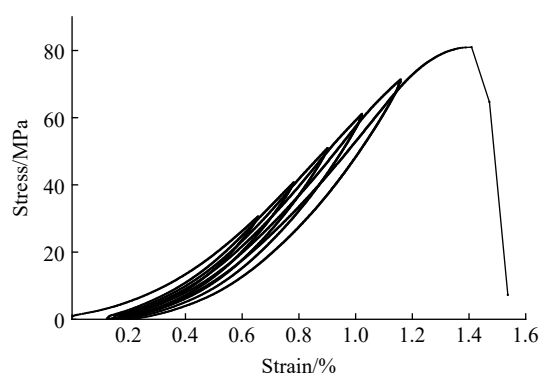


图 3 试验应力-应变曲线

Fig. 3 Stress-strain curve of the tests

第 1 等级加载的拟合校正系数只有 0.93, 拟合程度较低。这是由于第 1 次加载时, 加载峰值应力只有 30 MPa, 并且岩石在自然状态下, 内部有许多空隙和缝隙, 当初次加载时, 大多数情况只是将岩石内部空隙和缝隙压密, 损伤积累得也不明显, 因此并不十分符合所提出的岩石本构模型。

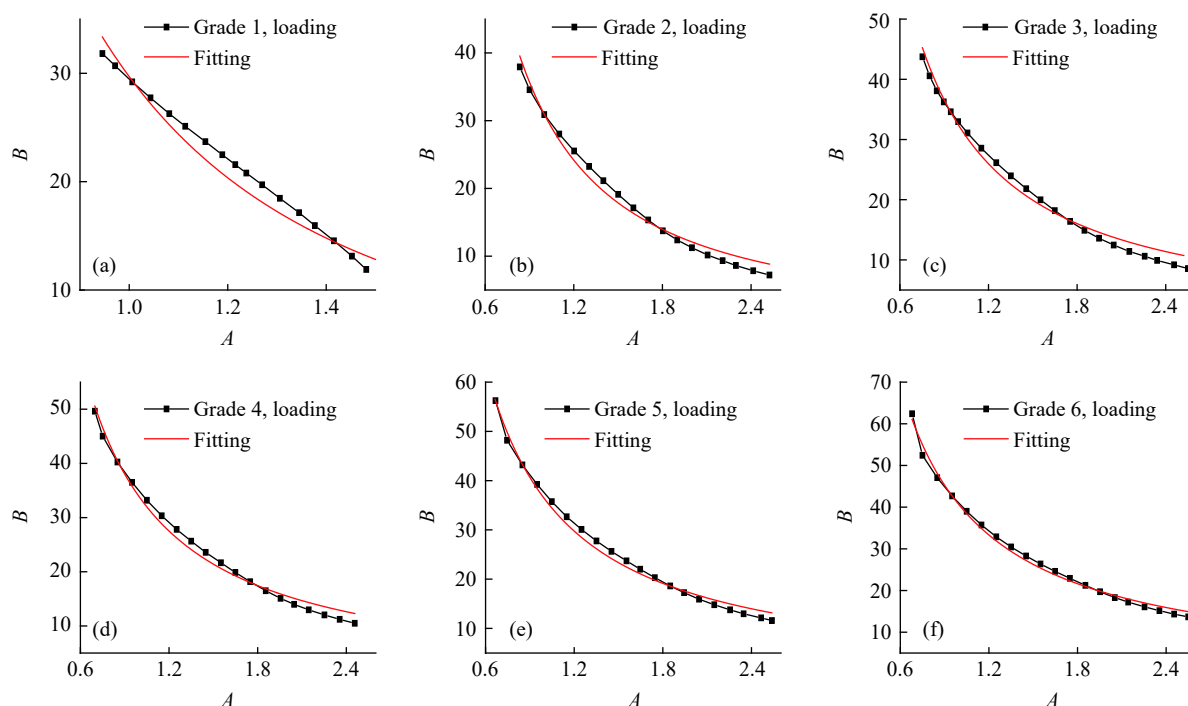


图 4 加载阶段 $B-A$ 曲线拟合

Fig. 4 $B-A$ fitting curve during loading stage

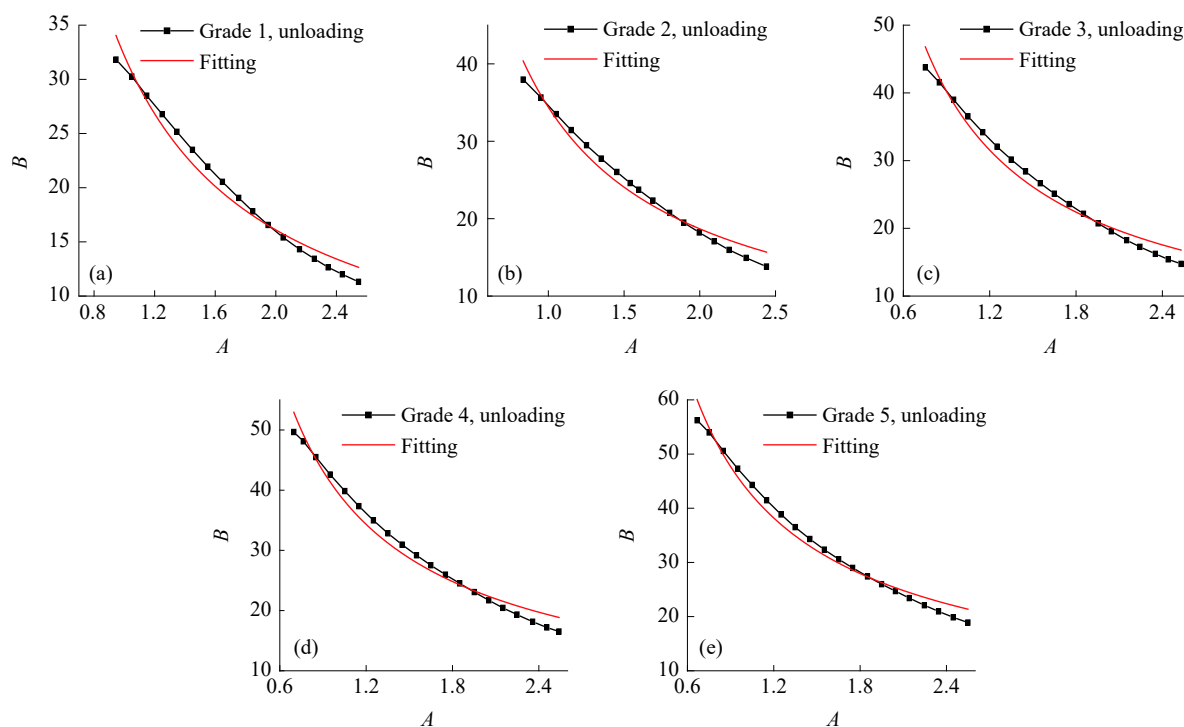


图 5 卸载阶段 $B-A$ 曲线拟合

Fig. 5 $B-A$ fitting curve during unloading stage

随着加-卸载等级的提高,拟合程度愈加完美,尤其在加载过程中表现得十分明显,岩石在不同等级加载下,开始时所承受的应力较小,随着等级增加,应力逐渐地增加,岩石内部损伤不断积累,故损伤本构模型的拟合效果趋于良好。另外,通过表 1 可以观察到,卸载过程时拟合效果提高得并不非常明显,但总体拟合效果良好。

表 1 加-卸载等级参数

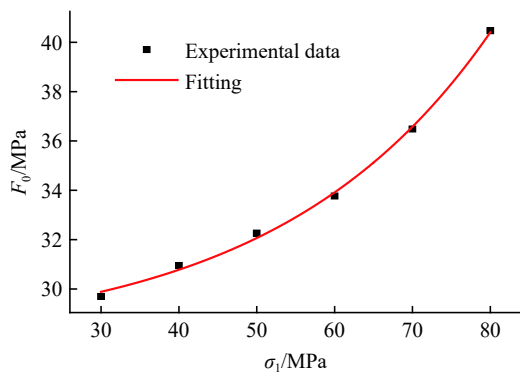
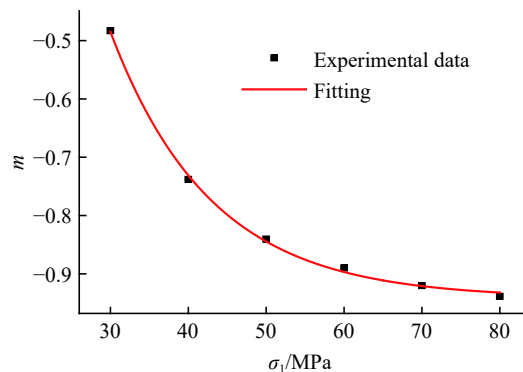
Table 1 Parameters of each loading and unloading level

Loading and unloading grade	m	F_0	R^2
Grade 1, loading	-0.483 01	29.691 94	0.932 97
Grade 2, loading	-0.737 97	30.952 10	0.983 45
Grade 3, loading	-0.840 34	32.264 57	0.984 80
Grade 4, loading	-0.890 04	33.767 98	0.988 36
Grade 5, loading	-0.920 34	36.484 55	0.991 11
Grade 6, loading	-0.938 51	40.468 44	0.993 62
Grade 1, unloading	-1.001 48	32.181 62	0.972 66
Grade 2, unloading	-1.135 50	34.403 39	0.975 51
Grade 3, unloading	-1.183 00	36.806 63	0.973 74
Grade 4, unloading	-1.252 52	39.700 14	0.976 53
Grade 5, unloading	-1.297 34	43.966 39	0.978 54

根据表 1 中各加-卸载等级的参数可知,参数 m 与加-卸载等级的大小呈反比,而参数 F_0 与加-卸载等级的大小呈正比,也就是说随着加-卸载等级的提高,参数 m 减小,参数 F_0 增大。在循环加-卸载过程中,岩石所受到的峰值应力逐渐增加,岩石强度逐渐增大,可认为岩石的强度随 F_0 的增大而增大,故 F_0 反映出岩石的宏观平均强度。另外,在不断的循环荷载作用下,岩石的微元强度有所减小,因此, m 有可能与岩石微元强度有关,反映了岩石微元强度分布的集中程度, m 越小,岩石塑性程度将越高,对于两个参数的性质及物理意义则需要更加具体的分析。

3.3 损伤本构模型的修正

通过以上对参数 m 、 F_0 的分析可以看出,参数 m 、 F_0 的变化规律受所施加应力的影响,如果能够分析参数 m 、 F_0 与所施加应力的关系并进行拟合,就能比较有效地对岩石损伤模型进行修正。如图 6、图 7 所示,将参数 m 、 F_0 分别作为纵坐标,岩石所受到的应力为横坐标,取每次循环加载的峰值应力 30、40、50、60、70、80 MPa 为横坐标参考点,可得到 F_0 - σ_1 与 m - σ_1 散点分布图,采用双曲线进行拟合,

图 6 Weibull 分布参数 F_0 与正应力 σ_1 的关系Fig. 6 Relation between Weibull distribution parameter F_0 and the normal stress σ_1 图 7 Weibull 分布参数 m 与正应力 σ_1 的关系Fig. 7 Relation between Weibull distribution parameter m and the normal stress σ_1

可得到

$$F_0 = 0.684\ 35 \exp(\sigma_1/27.491\ 45) + 17.846\ 35 \quad (19)$$

$$m = 4.660\ 29 \exp(-\sigma_1/12.917\ 26) - 0.941\ 63 \quad (20)$$

式(19)和式(20)的拟合系数分别高达 0.997 02 和 0.998 23, 也就是说在不同应力情况下参数 m 、 F_0 的变化规律较符合拟合公式。将式(19)、式(20)代入式(14), 即可得到修正后的损伤本构模型。

4 敏感性分析

通过对加-卸载过程中实验数据的拟合发现, 本构模型中的参数 m 、 F_0 具有一定的变化规律, 并且这些变化与刘树新等^[16]提出的 Weibull 参数变化规律相似。因此, 本研究进行了本构损伤模型参数的敏感性分析, 进一步确定参数的具体物理意义。

以拟合效果较好的第 6 次循环加载阶段为例, 首先将 m 固定为拟合值 -0.938 517 71, 分别对 F_0 取 20、25、30、35、40、45, 将其参数分别代入损伤本构模型, 即可得到 F_0 取值不同情况下的应力-应变曲线, 如图 8 所示。

从图 8 可以看出, 随着 F_0 的增大, 应力-应变曲线趋于平缓, 岩石的峰值强度也逐渐减小, 进一步表明参数 F_0 与岩石的宏观平均强度有关。另外, 从表 1 可以观察到, 随着加-卸载等级的增加, 参数 F_0 逐渐增加, 岩石的平均宏观强度逐渐降低。这是由于在不断加-卸载过程中, 岩石的内部损伤逐渐积累, 使得岩石宏观强度随之降低, 即对试样第 1 次加载达到某个值后卸载, 且试样不破坏, 对所得数据进行分析整理后, 对试样第 2 次加载达到某个值后卸载, 且试样不破坏, 再对所得数据进行分析整理后, 对试样进行第 3 次加载达到某个值后卸载, 且试样不破坏, 依次类推, 当进行第 6 次加载时试件破坏。进行多组试验, 取典型曲线进行敏感性分析, 最终得出参数 F_0 可能与岩石的平均宏观强度有关, 与参数 F_0 的敏感性情况一致。

同样以拟合效果较好的第 6 次循环加载阶段为例, 将参数 F_0 固定为拟合值 40.468 44, 分别对 m 取 0、-0.5、-1.0、-1.5、-2.0、-2.5。将其参数分别代入损伤本构模型, 即可得到 m 不同情况下的应力-应变曲线, 如图 9 所示。

从图 9 可以发现: 当理论应力值小于 32 MPa 时, 随着参数 m 的减小, 理论应力值逐渐减小; 反之, 当理论应力值大于 32 MPa 时, 随着参数 m 的减小, 理论应力值逐渐增大。除此之外, 随着参数 m 的减小, 理论应力值的增长速率是逐渐增加的, 其中参数 m 与岩石微元强度分布的集中程度有关, 即 m 越小, 岩石微元强度分布的集中程度越高, 理论应力值的增长速率越高, 故岩石脆性增加。岩石在初始加载时内部变形一般较小, 但随着循环加-卸载等级的增加, 岩石内部产生损伤逐渐积累, 其变形量将急剧增加, m 逐渐减小, 岩石微元强度分布的集中程度也越高, 岩石逐渐向脆性发展。

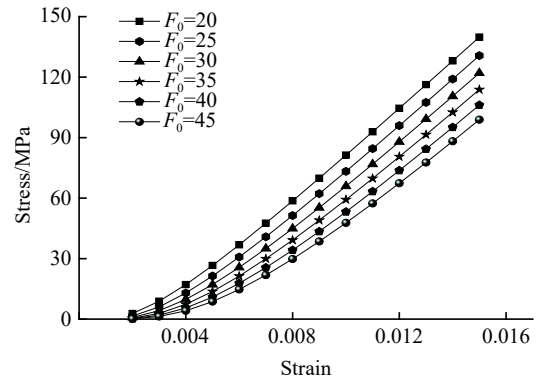


图 8 参数 F_0 的敏感性分析情况

Fig. 8 Sensitivity analysis of parameter F_0

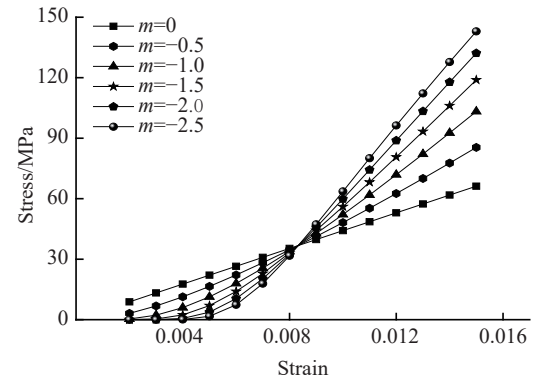


图 9 参数 m 敏感性分析情况

Fig. 9 Sensitivity analysis of parameter m

5 结 论

(1)从岩石损伤的理念出发,假设岩石的微元强度服从八面体剪应力理论并且微元破坏服从Weibull 概率公式,建立了基于八面体剪应力理论的循环加-卸载下岩石的损伤本构模型,该模型具有灵活性好、参数少、便于拟合等优点。

(2)在数据处理拟合过程中,采取先将本构损伤模型进行等式变换后再进行拟合的方法,将复杂的损伤本构拟合过程转变为较为简单的幂函数拟合,省去了非线性拟合数值选取的复杂过程,为损伤本构模型的拟合提供了一种新的参考方法。

(3)将数据拟合后得到的参数进行整理分析,并对所得到的参数值进行重新拟合分析,最终得到修正后的损伤本构模型,修正后的本构关系将更好地描述循环加-卸载曲线,比之前更具有实际意义。

(4)在循环加-卸载情况下,参数 F_0 与岩石的宏观平均强度有关,参数 m 与岩石微元强度分布的集中程度有关。随着加-卸载等级的提高,参数 m 减小,岩石微元强度分布的集中程度提高,岩石逐渐向脆性发展,而参数 F_0 增大,岩石的平均宏观强度则逐渐降低。

参考文献:

- [1] 徐志英. 岩石力学 [M]. 北京:水利电力出版社, 1986.
XU Z Y. Rock mechanics [M]. Beijing: Water Conservancy and Electricity Press, 1986.
- [2] 刘佑荣, 唐辉明. 岩体力学 [M]. 北京:中国地质大学出版社, 1999.
LIU Y R, TANG H M. Rock mass mechanics [M]. Beijing: China University of Geosciences Press, 1999.
- [3] 曹文贵, 方祖烈, 唐学军. 岩石损伤软化统计本构模型之研究 [J]. 岩石力学与工程学报, 1998, 17(6): 628–633.
CAO W G, FANG Z L, TANG X J. A study of statistical constitutive model for soft and damage rocks [J]. Journal of Rock Mechanics and Engineering, 1998, 17(6): 628–633.
- [4] 曹文贵, 赵明华, 唐学军. 岩石破裂过程的统计损伤模拟研究 [J]. 岩土工程学报, 2003, 25(2): 184–187.
CAO W G, ZHAO M H, TANG X J. Study on simulation of statistical damage in the full process of rock failure [J]. Journal of Geotechnical Engineering, 2003, 25(2): 184–187.
- [5] 曹文贵, 张升. 基于 Mohr-Coulomb 准则的岩石损伤统计分析方法研究 [J]. 湖南大学学报(自然科学版), 2005, 32(1): 43–47.
CAO W G, ZHANG S. Statistical analysis of rock damage based on Mohr-Coulomb criterion [J]. Journal of Hunan University (Natural Science Edition), 2005, 32(1): 43–47.
- [6] 袁小平, 刘红岩, 王志乔. 基于 Drucker-Prager 准则的岩石弹塑性损伤本构模型研究 [J]. 岩土力学, 2012, 33(4): 1103–1108.
YUAN X P, LIU H Y, WANG Z Q. Study of elastoplastic damage constitutive model of rocks based on Drucker-Prager criterion [J]. Geotechnical Mechanics, 2012, 33(4): 1103–1108.
- [7] 李西蒙, 刘长友, 鲁岩, 等. 单轴分级循环加载条件下砂岩疲劳变形特性与损伤模型研究 [J]. 中国矿业大学学报, 2017, 46(1): 8–17.
LI X M, LIU C Y, LU Y, et al. Fatigue deformation characteristics and damage model of sandstone subjected to uniaxial step cyclic loading [J]. Journal of China University of Mining and Technology, 2017, 46(1): 8–17.
- [8] 王者超, 赵建纲, 李术才, 等. 循环荷载作用下花岗岩疲劳力学性质及其本构模型 [J]. 岩石力学与工程学报, 2012, 31(9): 1888–1900.
WANG Z C, ZHAO J G, LI S C, et al. Fatigue mechanical behavior of granite subjected to cyclic load and its constitutive model [J]. Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2012, 31(9): 1888–1900.
- [9] 何明明, 陈蕴生, 李宁, 等. 单轴循环荷载作用下砂岩变形特性与能量特征 [J]. 煤炭学报, 2015, 40(8): 1805–1812.
HE M M, CHEN Y S, LI N, et al. Deformation and energy characteristics of sandstone subjected to uniaxial cyclic loading [J]. Journal of Coal Mine, 2015, 40(8): 1805–1812.
- [10] 张平阳, 夏才初, 周舒威, 等. 循环加-卸载岩石本构模型研究 [J]. 岩土力学, 2015, 12(36): 3354–3359.
ZHANG P Y, XIA C C, ZHOU S W, et al. A constitutive model for rock under cyclic loading and unloading [J]. Geotechnical Mechanics, 2015, 12(36): 3354–3359.
- [11] 夏才初, 张平阳, 周舒威, 等. 大规模压气储能洞室稳定性和洞周应变分析 [J]. 岩土力学, 2014, 35(5): 1391–1398.
XIA C C, ZHANG P Y, ZHOU S W, et al. Stability and tangential strain analysis of large-scale compressed air energy storage

- cavern [J]. *Geotechnical Mechanics*, 2014, 35(5): 1391–1398.
- [12] 徐卫亚, 韦立德. 岩石损伤统计本构模型的研究 [J]. *岩石力学与工程学报*, 2002, 21(6): 787–791.
XU W Y, WEI L D. Study on statistical damage constitutive model of rock [J]. *Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2002, 21(6): 787–791.
- [13] 章清叙, 葛修润, 黄铭, 等. 周期荷载作用下红砂岩三轴疲劳变形特性试验研究 [J]. *岩石力学与工程学报*, 2006, 25(3): 473–478.
ZHANG Q X, GE X R, HUANG M, et al. Testing study on fatigue deformation law of ren-sandstone under triaxial compression with cyclic loading [J]. *Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2006, 25(3): 473–478.
- [14] 葛修润, 卢应发. 循环荷载作用下岩石疲劳破坏和不可逆变形问题的探讨 [J]. *岩土工程学报*, 1992, 14(3): 56–60.
GE X R, LU Y F. Discussion on fatigue failure and irreversible deformation of rock under cyclic loading [J]. *Journal of Geotechnical Engineering*, 1992, 14(3): 56–60.
- [15] 葛修润, 蒋宇, 卢允德, 等. 周期荷载作用下岩石疲劳变形特性试验研究 [J]. *岩石力学与工程学报*, 2003, 22(10): 1581–1585.
GE X R, JIANG Y, LU Y D, et al. Testing study on fatigue deformation law of rock under cyclic loading [J]. *Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2003, 22(10): 1581–1585.
- [16] 刘树新, 刘长武, 韩小刚, 等. 基于损伤多重分形特征的岩石强度 Weibull 参数研究 [J]. *岩土工程学报*, 2011, 33(11): 1786–1791.
LIU S X, LIU C W, HAN X G, et al. Weibull distribution parameters of rock strength based on multi-fractal characteristics of rock damage [J]. *Journal of Geotechnical Engineering*, 2011, 33(11): 1786–1791.

Study and Correction of Cyclic Loading-Unloading Constitutive Model of Rock Based on Octahedral Theory

LUO Ji'an¹, LIU Fengmao², LIU Zhixi², MA Leiming², CHEN Yekai², LI Xinwei²

(1. *School of Mechanics and Optoelectronics Physics, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, Anhui, China;*

2. *School of Civil Engineering and Architecture, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, Anhui, China*)

Abstract: Exploring the stress and failure characteristics of rock is the key to study the safety of rock underground engineering, thus many scholars expect to make breakthrough in the study of rock constitutive model. In this paper, a constitutive model is proposed to describe the rock under cyclic loading and unloading. Firstly, it is assumed that the micro-unit strength of rock obeys Octahedral shear stress theory and the micro-unit failure of rock obeys Weibull probability formula, and the damage variables in rock constitution and the damage factors contained in micro-unit strength of rock expression are transformed into the constitutive equation. Then the parameters such as stress, strain and others representing the damage constitutive model of rock under loading and unloading can be obtained and are used to express the micro-unit strength and damage variables. Substituting the micro-unit strength and damage variables into the proposed rock constitutive model, a function expression can be carried out by an equation transformation. Through the comparison and analysis of the fitting data with the experimental results, the modified fitting parameters are acquired, and can be substituted into the function to revise the damage constitutive model. Finally, the necessary sensitivity analysis of the fitting parameters is implemented to obtain the practical physical significance of each fitting parameter.

Keywords: cyclic loading and unloading; constitutive model; octahedral shear stress theory; rock

金属材料试件在压缩、扭转、拉伸断裂过程中的应力状态变化及表征

伍星星, 刘建湖, 孟利平, 王海坤, 汪 俊

(中国船舶科学研究中心, 江苏 无锡 214082)

摘要:为更好地拟合断裂准则(JC、BW、MMC)参数,借助数值模拟手段,对Q345B和921A钢的压缩、扭转、拉伸试件的断裂过程进行了模拟,以应力三轴度、Lode参数作为衡量应力状态变化的重要指标,分析了两种金属材料断裂过程中试件典型位置的变化过程及断裂时刻试件的径向分布趋势,对比分析了Q345B和921A钢的不同类型试件在不同应力三轴度、不同Lode参数表征下的结果。计算结果表明:(1)除扭转试件外,压缩、拉伸试件在断裂过程中的应力状态不断发生变化,试件断裂时刻端口剖面的应力状态分布也不一致;(2)试件断裂过程是一个应力状态不断变化的过程,采用平均应力三轴度、平均Lode参数进行描述更加妥当;(3)对于同一尺寸的拉伸试件,不同金属材料断裂过程中的平均应力三轴度不尽相同。研究成果可为后续断裂准则(JC、BW、MMC)参数的拟合及材料断裂力学性能试验的开展提供指导。

关键词:断裂试验;应力三轴度;Lode参数;应力状态

中图分类号:O346.12

文献标识码:A

结构在冲击载荷作用下的断裂损伤与材料的应力状态存在重要关系,应力三轴度和Lode参数是应力状态的两种重要表征方式,常见的JC、BW断裂准则^[1-2]引入了应力三轴度对失效应变的影响,MMC断裂准则^[3]兼顾了应力三轴度和Lode参数的影响。Borvik等^[4]借助JC断裂准则对圆柱形平头弹体的穿甲过程进行了仿真分析;Gupta等^[5]借助JC模型研究了弹体头部不同形状对穿甲性能的影响,探讨了不同头部形状对靶板的毁伤破坏模式;肖新科等^[6]采用包含Lode参数影响的MMC断裂准则以及仅考虑应力三轴度影响的BW断裂准则,对平头钢弹体撞击下6061-T6铝合金薄靶的断裂行为和弹道极限进行了数值模拟研究,结果表明,两种断裂准则预测的弹体剩余速度与试验结果均具有较好的一致性,两者预测的弹道极限相近。但在预测2024-T351铝合金Taylor杆的断裂试验中,肖新科等^[7]指出,相较于JC、BW准则,MMC断裂准则能更好地预测弹体的裂纹形式。

开展材料断裂试验是获取JC、BW、MMC断裂准则参数的基础,Borvik等^[8]、Bao等^[9]、Gilioli等^[10]、Teng等^[11]通过开展系列扭转、压缩和拉伸试验,拟合得出了Weldox460E、6061-T6、2024-T351等材料的断裂准则参数。李营^[12]通过开展系列Q235钢断裂力学性能试验,拟合得到了JC失效参数。由于压缩、扭转和拉伸试件在断裂过程中的应力状态不断发生变化,若采用的应力状态评价标准不统一,可导致拟合得到的断裂准则参数存在较大差别,因此有必要系统地了解压缩、扭转和拉伸试件在受载过程中的应力状态变化过程及合适的表征方式,从而为后续恰当准确地拟合断裂准则(JC、BW、MMC)提供可靠依据。

* 收稿日期: 2020-02-26; 修回日期: 2020-03-06

基金项目: 国家安全重大基础研究项目(613279); 国防基础科研重点项目(JCKY2017207B054)

作者简介: 伍星星(1989-), 男, 硕士, 工程师, 主要从事舰船抗爆抗冲击研究. E-mail: 1063426501@qq.com

1 应力状态表征

应力状态的表征通常可以通过应力三轴度和 Lode 参数来表示,其中应力三轴度定义为静水压力 σ_m 与 Mises 等效应力 σ_{eq} 之比,表达式为

$$\eta = \frac{\sigma_m}{\sigma_{eq}} = \frac{(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3)/3}{\sqrt{2}[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_1 - \sigma_3)^2]/2} \quad (1)$$

式中: η 为应力三轴度; σ_1 、 σ_2 、 σ_3 为主应力,且假设 $\sigma_1 > \sigma_2 > \sigma_3$ 。

Lode 参数表示为应力状态的中间主应力与其他两个主应力的相对比值,表达式为

$$\mu_\sigma = \frac{2\sigma_2 - \sigma_1 - \sigma_3}{\sigma_1 - \sigma_3} \quad (2)$$

2 断裂力学性能试验

为系统地研究试件在断裂过程中的应力状态变化,分别对 Q345B 钢(代表低碳钢)及 921A 钢(代表高强钢)进行断裂试验,试件类型包括光滑圆棒试件、缺口圆棒拉伸试件、扭转试件、压缩试件等。两种钢材的试件设计尺寸完全一致。

2.1 光滑圆棒和缺口圆棒的拉伸试验

光滑圆棒和缺口圆棒试件尺寸分别如图 1、图 2 所示,缺口圆棒试件的缺口半径分别为 2、6 和 18 mm,参照 GB/T 228—2002《金属材料室温拉伸试验方法》制作。拉伸试验利用国防科学技术大学力学实验室的 WDW-100DIII 微机控制电子万能试验机开展,在试件标距段安装引伸计,引伸计标距为 50 mm,量程为 25 mm,重复进行 5 次试验以保证试验数据的有效性。

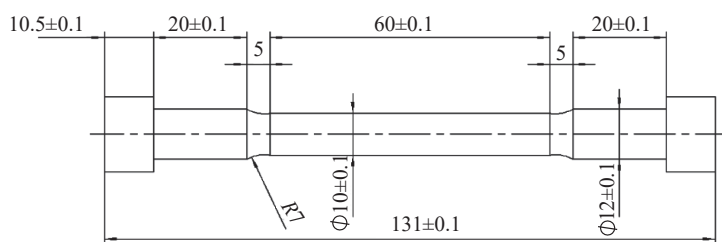


图 1 光滑圆棒拉伸试件尺寸(单位: mm)

Fig. 1 Dimensions of round smooth tension specimen (Unit: mm)

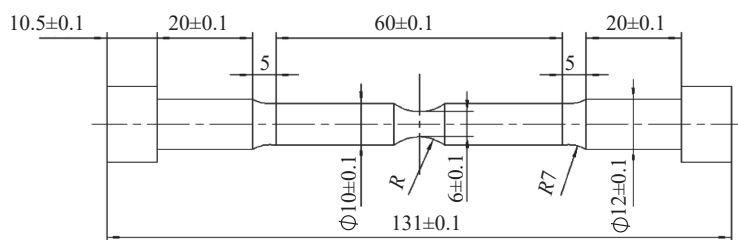


图 2 缺口圆棒拉伸试件尺寸(单位: mm)

Fig. 2 Dimensions of notched round tension specimen (Unit: mm)

2.2 扭转试验

扭转试验在国防科学技术大学力学实验室的 NDW-500 III 微机控制电子万能试验机上进行,采用扭转试验专用夹具,试验机的两夹头之一可以沿轴向自由移动,对试件无附加轴向力,两夹头保持同轴。扭转试件的尺寸如图 3 所示,试件制作标准参照拉伸试验,重复进行 5 次试验以保证试验数据的有效性。

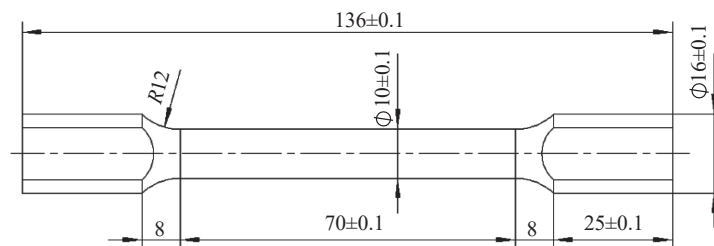


图 3 扭转试件尺寸(单位: mm)

Fig. 3 Dimensions of torsion specimen (Unit: mm)

2.3 压缩试验

压缩试验在国防科学技术大学力学实验室的 WDW-100DⅢ 微机控制电子万能试验机上进行。试件制作标准参照拉伸试验, 压缩试件的长径比为 3 : 2, 此长径比既可保证试件有足够的压缩空间, 又避免了试件过于细长导致的压杆失稳。试件与试验机的接触面预制倒角, 避免试验时试件接触面边缘产生应力集中。试件尺寸如图 4 所示, 重复进行 5 次试验以保证试验数据的有效性。

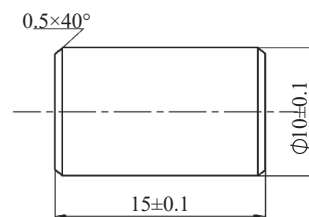


图 4 压缩试件尺寸(单位: mm)

Fig. 4 Dimensions of compression specimen (Unit: mm)

3 试件断裂过程中的应力状态

3.1 计算模型

通过 ABAQUS 程序建立有限元模型。为提高计算效率, 光滑圆棒、缺口圆棒、扭转和压缩试件均采用二维轴对称模型, 模型一端固定, 另一端施加位移或者转角载荷。模型如图 5 所示, 其中 R 为缺口半径。依据文献 [13], 当有限元模型网格尺寸小于 0.1 mm 时, 网格尺寸对试件失效应变的影响可忽略, 本研究中所有试件的有限元模型网格尺寸均取 0.1 mm。考虑到模拟的主要目的是获取试件断裂过程中应力状态的变化, 为得到与试验较为一致的准确值, 需保证计算输出的载荷-位移曲线与试验曲线一致。图 6、图 7 分别显示了 Q345B 和 921A 钢试件的试验载荷-位移曲线与有限元计算结果对比。针对光滑圆棒、压缩和扭转试件, 模拟过程中的材料参数选取 JC 本构模型参数, 取值如表 1 所示。对于缺口拉伸试件, 采用上述参数难以获得与试验一致的效果, 初步分析原因为材料的应力状态对其本构模型存在一定影响, 因此计算过程中反复调试输入应力、应变值, 直至仿真载荷-位移曲线与试验曲线一致。JC 模型表示为

$$\bar{\sigma} = (A + B\epsilon^n)[1 + C \ln(\epsilon/\dot{\epsilon})] \quad (3)$$

式中: $\bar{\sigma}$ 为应力, A 为屈服强度, B 为硬化强度, n 为硬化指数, C 为应变率参数, ϵ 为应变, $\dot{\epsilon}$ 为参考应变率。

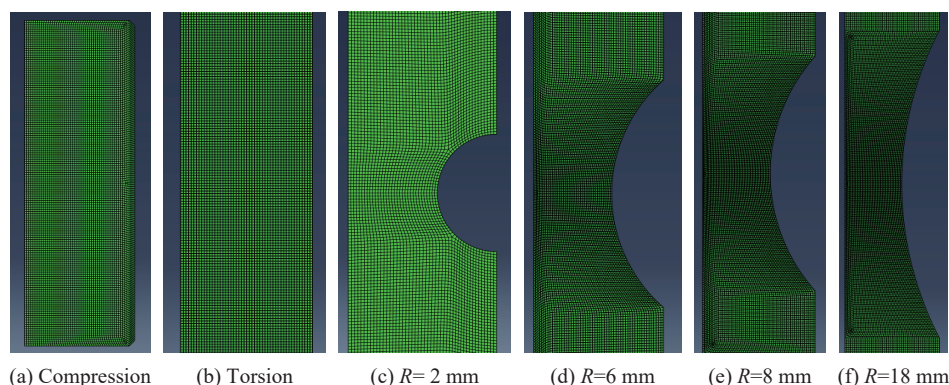


图 5 试件的有限元模型

Fig. 5 Finite element models of tested specimens

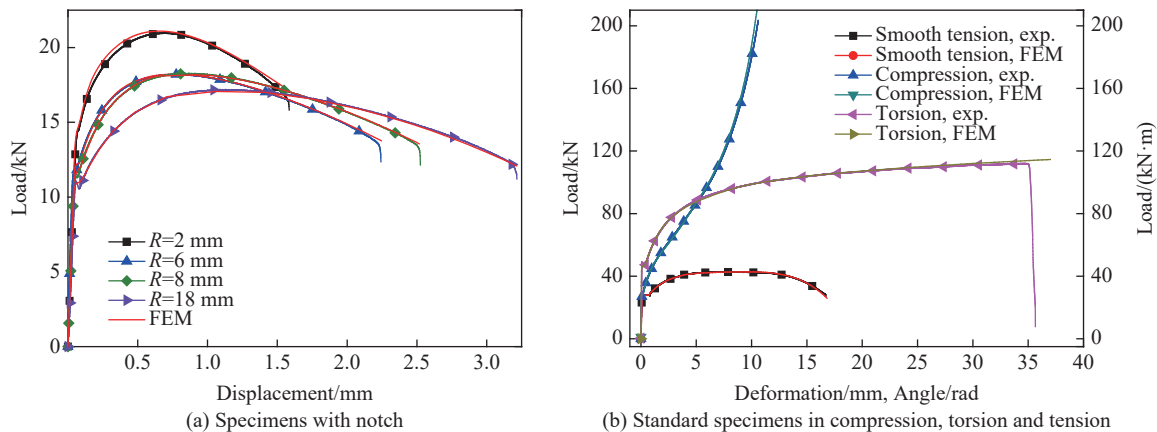


图 6 试验和有限元计算得到的载荷-位移曲线对比(Q345B 钢)

Fig. 6 Comparisons of the displacement-load curves between experimental results and simulation results(Q345B steel)

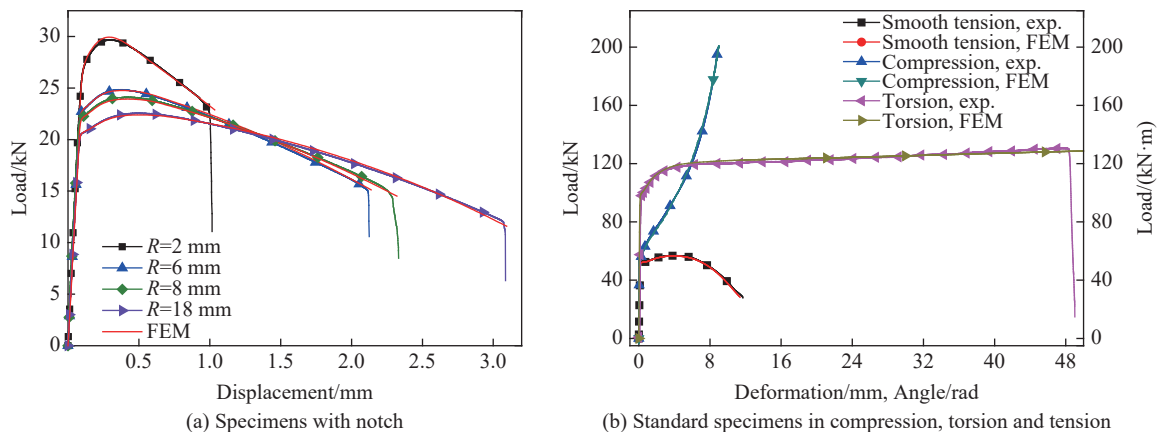


图 7 试验和有限元计算得到的载荷-位移曲线对比(921A 钢)

Fig. 7 Comparisons of the displacement-load curves between experimental results and simulation results(921A steel)

表 1 JC 强度模型参数

Table 1 Parameters of JC strength model

Material	A/MPa	B/MPa	n	C	$\dot{\epsilon}/\text{s}^{-1}$
Q345B steel	360	700	0.547	0.046	0.002
921A steel	700	706	0.580	0.013	0.002

3.2 结果分析

3.2.1 断裂过程中的应力状态变化

计算发现, Q345B 和 921A 钢试件的应力状态变化趋势基本一致, 本节以 921A 钢试件为例进行分析。

压缩试件在模拟过程中需要考虑摩擦, 这里摩擦系数取为 0.1。对于压缩试件, 选取压缩后直径最大截面处的中心单元 (Center element) 和表面单元 (Radical element) 作为典型单元, 压缩试件受力过程中典型单元的应力三轴度、Lode 参数变化如图 8 所示。由图 8 可以看出, 中心单元基本处于压缩状态, 对应的应力三轴度从最初的 -0.33 最低下降至 -0.65 左右, 最终断裂时刻的应力三轴度为 -0.55, 而 Lode 参数在此过程中始终保持为 1.00, 这主要是由于该单元处于轴对称模型中心处, 有两方向的主应力相等。表面单元的应力状态变化较复杂, 从最初的单向受压状态依次转变为压剪、拉剪状态, 因此应力三轴度基本处于不断上升过程, 而对应的 Lode 参数却呈现相反的趋势, 处于不断下降过程。根据试件破坏状态来看, 压缩试件的断裂一般从试件外表面开始。

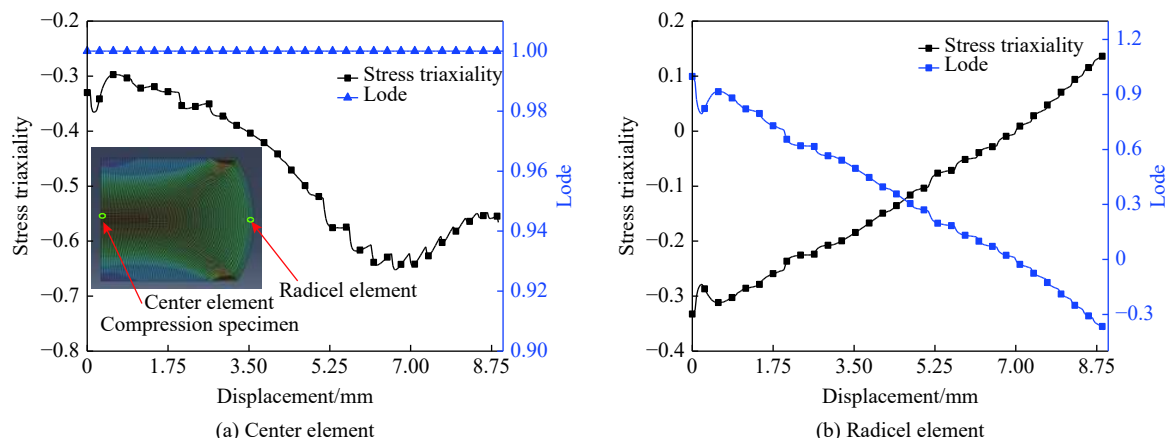


图 8 压缩试件受力过程中应力三轴度和 Lode 参数变化(921A 钢)

Fig. 8 Changes of stress triaxiality and Lode value in the loading process of compression specimen (921A steel)

试件在扭转过程中表面上的点往往最先开始断裂,选取中间区域同一截面处中心单元和表面单元进行分析,扭转试件受力过程中典型单元的应力三轴度、Lode 参数变化如图 9 所示。由图 9 可以看出,两处单元的应力三轴度基本为零,但中心单元的 Lode 参数为-0.96,表面单元的 Lode 参数为-0.61,根据试件破坏状态来看,扭转试件的断裂一般从试件中心开始。

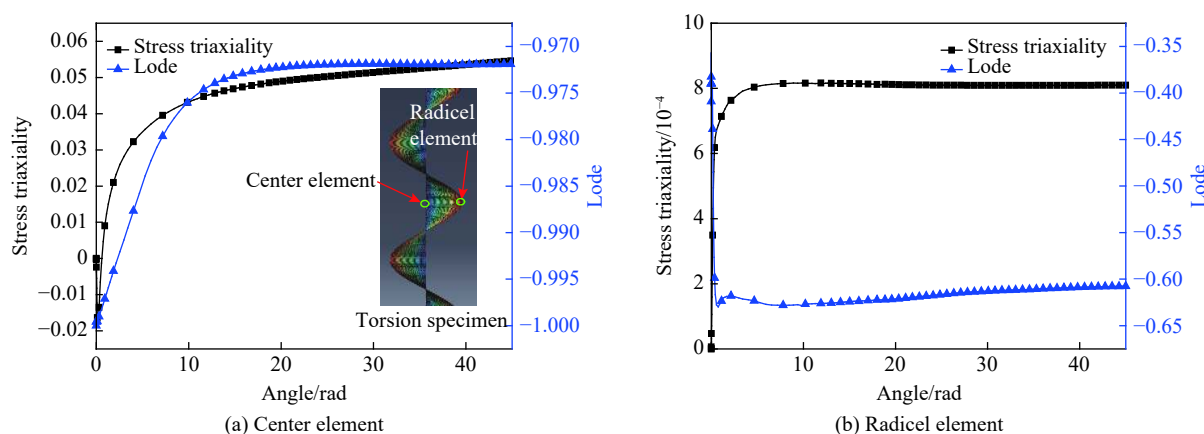


图 9 扭转试件受力过程中应力三轴度和 Lode 参数变化(921A 钢)

Fig. 9 Changes of stress triaxiality and Lode value in the loading process of torsion specimen (921A steel)

拉伸过程中试件的塑性应变基本集中在颈缩区域,断裂也往往从颈缩区域的中心部位开始,选取光滑拉伸试件和 $R=8\text{ mm}$ 缺口拉伸试件作为典型代表,分别选取试件颈缩处的中心单元和表面单元进行分析,其受力过程中典型单元的应力三轴度、Lode 参数变化分别如图 10 和图 11 所示。由图 10 可知,对于光滑拉伸试件,中心单元的应力三轴度在开始阶段一直处于单轴拉伸状态,当试件开始发生颈缩后,单元应力三轴度逐渐增大;表面单元的应力三轴度在开始阶段也处于单轴拉伸状态,而后开始先减小后增大,基本处于拉剪状态。两处单元的应力状态变化表明,试件颈缩后应力状态由单向应力状态转变为复杂应力状态。从 Lode 参数来看,中心单元的 Lode 参数值始终为-1.00,同压缩试件类似,主要是由于该单元处于轴对称模型中心处;表面单元的 Lode 参数值在开始阶段保持为-1.00,进入颈缩阶段后先增大后减小,与该单元的应力三轴度变化呈现相反的趋势。由图 11 可知,8 mm 缺口拉伸试件中心单元进入塑性变形后应力三轴度先跳跃式增大,然后稍微减小,随后随着拉伸位移的增大应力三轴度不断增大,但在此过程中单元 Lode 参数值始终为-1.00;表面单元在进入塑性变形后应力三轴度先小幅增大,然后快速减小,最后逐步增大,而 Lode 参数却基本呈现相反的变化趋势。从试件破坏状态来看,拉伸试件的断裂一般从试件中心开始。

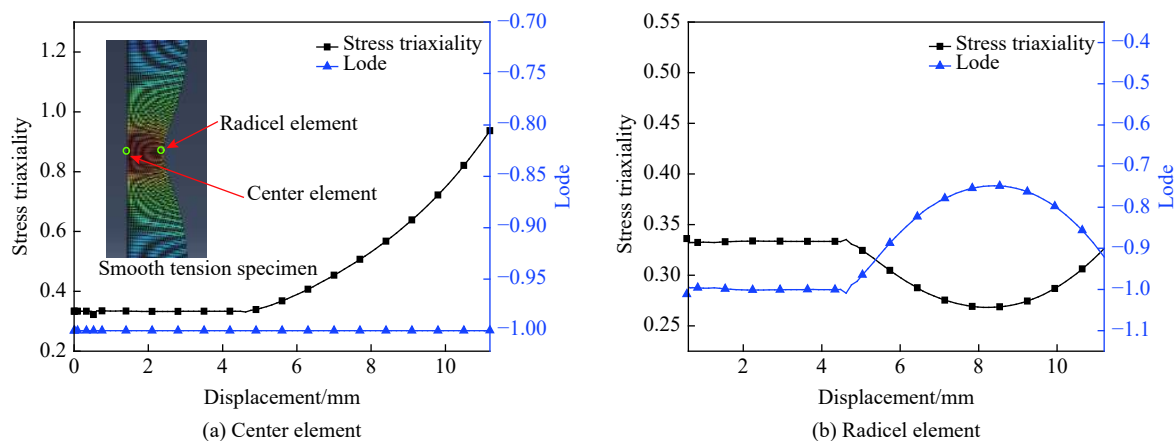


图 10 光滑拉伸试件受力过程中应力三轴度和 Lode 参数变化(921A 钢)

Fig. 10 Changes of stress triaxiality and Lode value in the loading process of smooth tension specimen (921A steel)

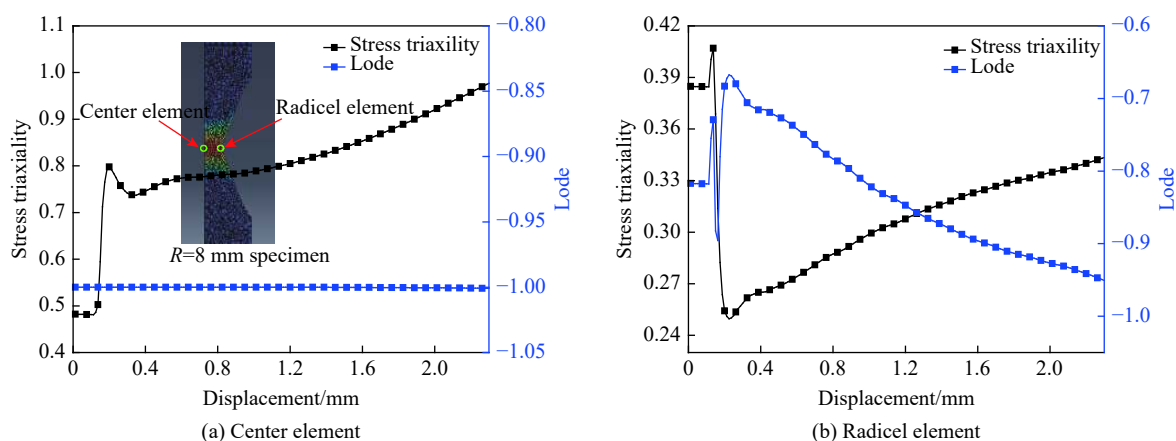


图 11 8 mm 缺口拉伸试件受力过程中应力三轴度和 Lode 参数变化(921A 钢)

Fig. 11 Changes of stress triaxiality and Lode value in the loading process of tension specimen with a 8 mm notch (921A steel)

3.2.2 断裂时刻的应力状态分布

本节主要分析压缩、扭转、拉伸试件断裂时刻断口应力状态的径向分布,其中压缩试件取墩粗直径最大的中间截面,扭转试件取中间截面,拉伸试件取颈缩面。计算发现, Q345B 和 921A 钢试件的应力状态径向分布趋势基本一致,本节以 Q345B 钢试件为例进行分析。

压缩试件在断裂时刻的应力三轴度、Lode 参数的径向分布如图 12 所示,其中横坐标 R^* 为无量纲距离,表示断面上点到中心的距离与断面半径的比值。

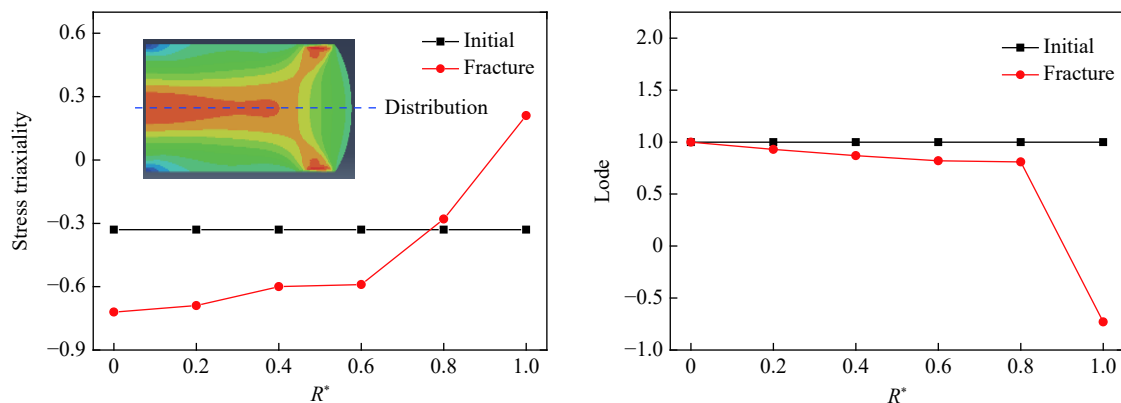


图 12 断裂时刻压缩试件应力三轴度和 Lode 参数的径向分布(Q345B 钢)

Fig. 12 Radial distribution of stress triaxiality and Lode value of the compressive specimen at final failure (Q345B steel)

由图 12 可以看出,压缩试件在开始阶段的最大截面应力三轴度、Lode 参数基本保持一致,但在断裂时刻截面应力状态分布十分不均匀,应力三轴度沿着径向逐渐增大,应力状态逐渐由中心区域的压缩状态向边界区域的拉剪状态转变。

扭转试件在断裂时刻的应力三轴度和 Lode 参数的径向分布如图 13 所示。扭转试件断面各处应力三轴度、Lode 参数在初始阶段、断裂阶段基本都为零,保持剪切状态。

选取光滑试件和 2 mm 缺口试件作为典型代表分析拉伸试件在断裂时刻应力三轴度和 Lode 参数的径向分布,分别如图 14 和图 15 所示。由图 14 和图 15 可知:对于光滑试件,初始阶段截面各处应力三轴度、Lode 参数保持一致;而对于 2 mm 缺口试件,初始阶段截面各处应力三轴度沿径向逐渐减小,Lode 参数沿径向逐渐增大。断裂时刻两种试件的应力三轴度分布趋势基本一致,即沿径向逐渐减小,试件中心处应力三轴度最大,在断裂时刻截面各处的 Lode 参数基本为-1.00。

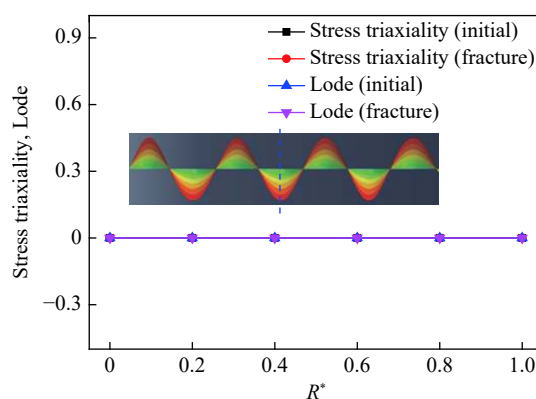


图 13 断裂时刻扭转试件应力三轴度和 Lode 参数的径向分布(Q345B 钢)

Fig. 13 Radial distribution of stress triaxiality and Lode value of the torsion specimen at final failure(Q345B steel)

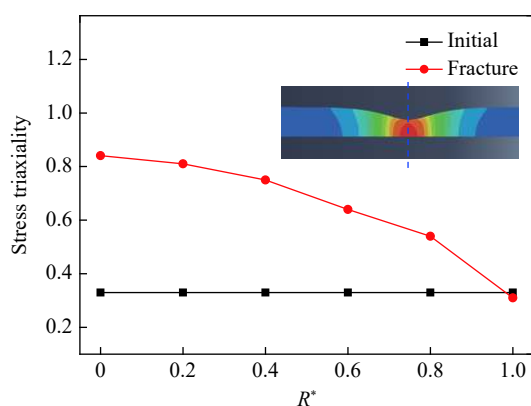


图 14 断裂时刻光滑拉伸试件应力三轴度和 Lode 参数的径向分布(Q345B 钢)

Fig. 14 Radial distribution of stress triaxiality and Lode value of the smooth tension specimen at final failure(Q345B steel)

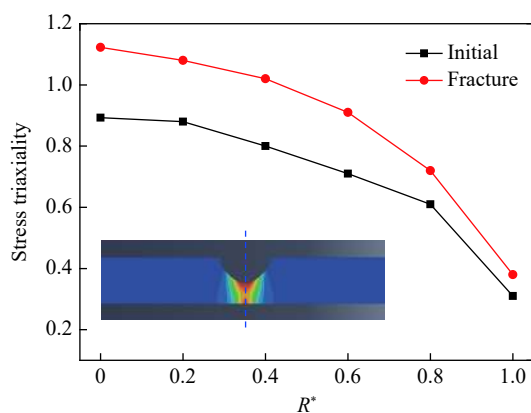
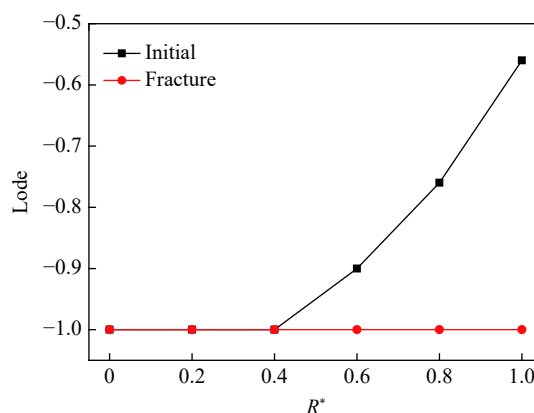
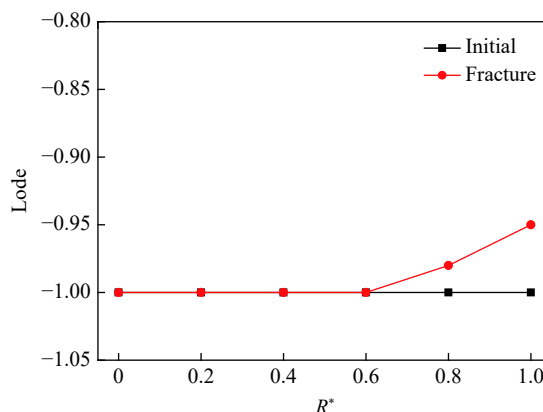


图 15 断裂时刻带有 2 mm 缺口的拉伸试件的应力三轴度和 Lode 参数径向分布(Q345B 钢)

Fig. 15 Radial distribution of stress triaxiality and Lode value of the tensile specimen with a 2 mm notch at final failure(Q345B steel)



由此可知,压缩、扭转、拉伸试件在受力过程中断裂面各处不仅应力状态时刻发生变化,而且应力状态分布也不一致。若直接采用试件受力初始阶段的应力状态进行表征,将引起较大的误差,采用断裂时刻的应力状态进行表征又过于偏大,忽略了变形过程中应力状态的变化,因此取整个过程应力状态的平均值进行表征比较恰当。

3.3 对比分析

表 2、表 3 分别给出了各类试件应力三轴度、Lode 参数的不同表征方法,其中平均应力三轴度可参考文献 [14] 中的方法进行计算

$$\eta_{\text{avg}} = \frac{1}{\varepsilon_f} \int_0^{\varepsilon_f} \eta(\varepsilon_{\text{eq}}) d\varepsilon_{\text{eq}} \quad (4)$$

式中: η_{avg} 为平均应力三轴度, ε_f 为失效应变, ε_{eq} 为等效应变。

表 2 各类试件应力三轴度不同表征方法对比

Table 2 Comparison of the stress triaxiality among different specimens

Specimen type	Stress triaxiality (Q345B steel)			Stress triaxiality (921A steel)		
	Initial	Fracture	Average	Initial	Fracture	Average
Compression	-0.333	0.179	-0.120	-0.333	0.156	-0.116
Torsion	0	0	0	0	0	0
Smooth tension	0.333	0.841	0.562	0.333	0.987	0.668
With a 18 mm notch	0.413	0.867	0.663	0.413	1.075	0.825
With a 8 mm notch	0.505	0.915	0.752	0.505	1.133	0.919
With a 6 mm notch	0.556	0.947	0.805	0.556	1.160	0.973
With a 2 mm notch	0.893	1.123	1.085	0.893	1.451	1.400

表 3 各类试件 Lode 参数不同表征方法对比

Table 3 Comparison of the Lode parameter among different specimens

Specimen type	Lode (Q345B steel)			Lode (921A steel)		
	Initial	Fracture	Average	Initial	Fracture	Average
Compression	1.00	-0.73	0.24	1.00	-0.22	0.45
Torsion	0	0	0	0	0	0
Smooth tension	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00
With a 18 mm notch	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00
With a 8 mm notch	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00
With a 6 mm notch	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00
With a 2 mm notch	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00	-1.00

同理,平均 Lode 参数也可参照类似方法求出

$$\mu_{\sigma\text{avg}} = \frac{1}{\varepsilon_f} \int_0^{\varepsilon_f} \mu_{\sigma}(\varepsilon_{\text{eq}}) d\varepsilon_{\text{eq}} \quad (5)$$

从应力三轴度不同的表征方法来看,除扭转试件外,压缩、拉伸试件断裂时刻的应力三轴度、平均应力三轴度与初始值相比均发生较大变化,但从 Lode 参数不同的表征方法来看,仅有压缩试件断裂时刻的 Lode 参数、平均 Lode 参数发生了改变,扭转、拉伸试件基本保持不变。

不同类型试件断裂时刻的应力三轴度、平均应力三轴度相对初始应力三轴度的变化规律如图 16 所示,其中: η_{init} 表示初始应力三轴度, δ 表示相对初始应力三轴度增大的百分比。总体而言,试件断裂时刻的应力三轴度、平均应力三轴度相对初始应力三轴度增大的幅度与初始应力三轴度存在较大关

系。对于压缩试件, Q345B 和 921A 钢试件增大的百分比基本一致。但对于拉伸试件, 断裂时刻的应力三轴度、平均应力三轴度增大的幅度随着初始应力三轴度的增大而减小, 且 921A 钢增大的幅度大于 Q345B 钢。从增大幅度来看, 与初始应力三轴度相比, 断裂时刻的应力三轴度最大可提高 196%, 平均应力三轴度最大可提高 100%。

综合分析可知: 采用不同的应力状态表征方法描述试件的应力状态会存在较大偏差, 考虑到断裂过程是一个应力状态不断变化的过程, 采用平均应力三轴度和平均 Lode 参数进行描述更加稳妥, 因此后续断裂准则(JC、BW、MMC)拟合过程中应采用平均应力三轴度和平均 Lode 参数。

考虑到现阶段常用的商业软件基本集成了 JC 失效模型, 根据分析结果, 采用平均应力三轴度拟合获得的 JC 失效模型参数(D_1 、 D_2 、 D_3)见表 4。

此外, 对于同一尺寸拉伸试件, 921A 钢拉伸的平均应力三轴度较 Q345 钢要大, Bao 等^[15]提出的平均应力三轴度修正公式表示为

$$\eta = \frac{1}{3} + 1.4 \ln \left(1 + \frac{a}{2R} \right) \quad (6)$$

式中: a 为圆棒缺口中心处半径, R 为缺口半径。该公式并非适用于任何金属材料。

4 结 论

以前期开展的 Q345B、921A 钢材料断裂力学性能试验(压缩、扭转和拉伸试验)为基础, 借助数值仿真手段, 对压缩、扭转、拉伸试件的断裂过程进行了模拟, 分析了各试件断裂过程中典型位置的应力状态变化及断裂时刻断口截面的应力状态分布, 得出如下结论:

(1) 扭转试件断裂过程中应力状态基本保持不变, 断裂时刻断口截面各处的应力状态基本一致, 基本保持为剪切状态, 应力三轴度和 Lode 参数基本都为零;

(2) 压缩、拉伸试件断裂过程中应力状态处于不断变化过程, 压缩试件中心单元的应力三轴度基本处于不断减小的状态, 而拉伸试件中心单元的应力三轴度处于不断增大的状态;

(3) 压缩试件断裂时刻断口截面各处的应力三轴度沿着径向呈逐渐增大趋势, 拉伸试件断裂时刻断口截面应力三轴度沿着径向呈逐渐减小趋势;

(4) 试件断裂过程是一个应力状态不断变化的过程, 采用平均应力三轴度、平均 Lode 参数进行描述更加妥当, 因此后续断裂准则(JC、BW、MMC)拟合过程中应采用平均应力三轴度、平均 Lode 参数。

参考文献:

- [1] JOHNSON G R, COOK W H. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures [C]//Proceeding of the 7th International Symposium on Ballistic. The Hague, Netherlands, 1983: 541-547.
- [2] BAO Y B, WIERZBICKI T. A comparative study on various ductile crack formation criteria [J]. *Journal of Engineering Material and Technology*, 2004, 126: 314-324.
- [3] BAO Y B, WIERZBICKI T. Application of extended Mohr-Coulomb criterion to ductile fracture [J]. *International Journal of Fracture*, 2010, 161(1): 1-20.

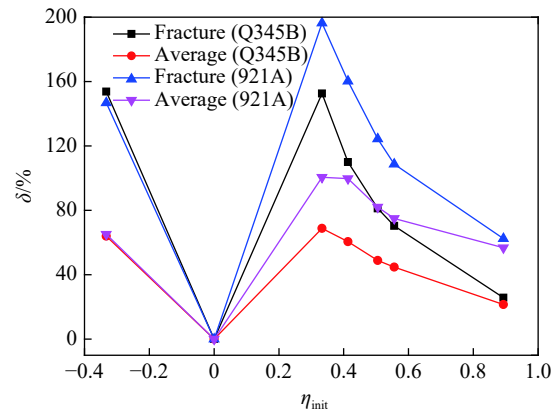


图 16 不同试件断裂时刻应力三轴度、平均应力三轴度增加百分比的对比

Fig. 16 Increases of the stress triaxiality and Lode parameter for specimens at final failure

表 4 拟合 JC 参数取值
Table 4 JC failure model constant

Material	D_1	D_2	D_3
Q345B steel	1.816	-0.353	1.056
921A steel	2.475	-0.661	0.650

- [4] BORVIK T, HOPPERSTAD O S. A computational model of viscoplasticity and ductile damage for impact and penetration [J]. *European Journal of Mechanics Solids*, 2001, 20(5): 685–712.
- [5] GUPTA N K, IQBAL M A. Experiment and numerical studies on the behavior of thin aluminum plates subjected to impact by blunt and hemispherical-nosed projectile [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2006, 32(12): 1921–1944.
- [6] 肖新科, 王要沛, 王爽, 等. 应力状态在球形弹丸撞击 6061-T6 铝薄靶弹道行为数值预报中的作用 [J]. *振动与冲击*, 2015, 34(22): 87–91.
- XIAO X K, WANG Y P, WANG S, et al. Effect of stress state on the numerical prediction of ballistic resistance of thin 6061-T6 aluminum alloy targets against sphere projectile impacts [J]. *Journal of Vibration and Shock*, 2015, 34(22): 87–91.
- [7] 肖新科, 王要沛, 张伟. 应力状态在 2024-T351 Taylor 杆断裂行为数值预报中的作用 [J]. *北京理工大学学报*, 2016, 36(1): 157–161.
- XIAO X K, WANG Y P, ZHANG W. Effect of stress state on the numerical prediction of the fracture behavior of 2064-T351 aluminium alloy Taylor rods [J]. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2016, 36(1): 157–161.
- [8] BORVIK T, HOPPERSTAD O S. Numerical simulation of plugging failure in ballistic penetration [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2001, 38(25): 6241–6264.
- [9] BAO Y B, WIERZBICKI T. On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2004, 46(12): 81–98.
- [10] GILIOLI A, WIERZBICKI T. Predicting ballistic impact failure of aluminium 6061-T6 with the rate-independent Bao-Wierzbicki fracture model [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2015, 76(15): 207–220.
- [11] TENG X, WIERZBICKI T. Evaluation of six fracture models in high velocity perforation [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2006, 73(12): 1653–1678.
- [12] 李营. 液舱防爆炸破片侵彻作用机理研究 [D]. 武汉: 武汉理工大学, 2014.
- LI Y. Fragment resistant mechanism research of safety liquid cabin [D]. Wuhan: Wuhan University of Technology, 2014.
- [13] 孟利平. 应变率和应力三轴度对船用钢变形和断裂的影响研究 [D]. 无锡: 中国船舶科学研究中心, 2016.
- MENG L P. Influence of strain rate and stress triaxiality on the deformation and fracture behavior of ship hull steel [D]. Wuxi: China Ship Scientific Research Center, 2016.
- [14] BAO Y B, WIERZBICKI T. On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2004, 46(1): 81–98.
- [15] BAO Y B, WIERZBICKI T. On the cut-off value of negative triaxiality for fracture [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2005, 72(7): 1049–1069.

Variation of Stress Distribution in Metal Fracture Process under Compressive, Torsional, and Tensile Loading

WU Xingxing, LIU Jianhu, MENG Liping, WANG Haikun, WANG Jun

(China Ship Scientific Research Center, Wuxi 214082, Jiangsu, China)

Abstract: In order to accurately fit the failure criteria in JC failure model, BW failure model, and MMC failure model, numerical simulations for metal materials Q345B and 921A under various loading conditions of compression, torsion, tension were performed in this work. The variation of stresses, indicated by stress triaxiality and Lode parameter, was investigated during the fracture progress. The results indicated: (1) exclusive of torsional loading, the stress distribution varied in the cracking plane as the crack growth; (2) the average stress triaxiality and Lode parameter are more suitable for describing the stress status; (3) for specimens having the same size, the value of average stress triaxiality was dependent on metal properties. This work would provide useful knowledge for obtaining the failure criterion from material failure experiments.

Keywords: failure experiments; stress triaxiality; Lode parameter; stress status

高围压下砂岩循环加-卸载损伤本构及损伤阈值

刘之喜

(安徽理工大学土木建筑学院, 安徽 淮南 232001)

摘要:在深部巷道掘进过程中,岩体受周期荷载和高地应力共同作用,一般的强度准则无法对岩石的应力-应变曲线进行描述和表征,而高地应力下岩石的循环加-卸载本构是预测深部巷道在周期荷载作用下长期稳定性的关键,因此关于高围压下岩石的本构研究具有一定的工程意义。岩石受外部荷载直至破坏的过程是旧裂纹扩展和新裂纹增长、扩展的过程,已有的研究表明,单位体积岩石裂纹数服从 Weibull 分布,Griffith 准则认为岩石的破坏是由岩石的裂纹扩展所导致的,为此通过对 Weibull 建立的统计损伤本构扩展,基于裂纹数服从 Weibull 分布以及裂纹扩展服从 Griffith 准则,建立了高围压下岩石循环加-卸载统计损伤本构。通过本构的等式变换,对本构损伤阈值进行了研究,并进一步以砂岩的偶数次循环加-卸载试验数据对本构参数进行拟合,得到参数的演化规律,将本构理论值与砂岩奇数次循环加-卸载试验数据对比,验证了本构模型的正确性,为高围压下岩石的循环加-卸载本构研究提供了新的思路。

关键词:高围压;循环加-卸载;本构模型;损伤阈值

中图分类号:TU457; O347.3

文献标识码:A

地下岩石工程经常受到加-卸载作用,如交通、地震、巷道掘进等,为此诸多学者对岩石的加-卸载性质展开研究,然而这些研究极少涉及深部高地应力下岩石的加-卸载本构。深部岩体开挖作为高围压下岩石加-卸载作用的经典例子,在其掘进期间,围岩受到高围压及加-卸载的反复作用,其动力响应随之改变,对围岩长期稳定性的影响颇大,目前关于高围压下岩石循环加-卸载本构模型的研究较少。许多专家主要针对深部开采的定量界定与分析、低围压岩石本构模型建立、循环加-卸载试验方法、疲劳变形特性、能量耗散等方面进行研究,取得了丰硕的成果^[1-6]。

目前岩石循环加载损伤本构模型的建立主要有两种方法:一是通过加-卸载试验,假设岩石服从某些数学模型,从而建立岩石的数学本构模型;二是在岩石中引入损伤变量,为可靠地利用统计物理的概念奠定基础,这方面的开创性工作为 Weibull 的统计尺寸效应理论,即假设岩石的微元破坏服从 Weibull 公式,微元强度服从某一强度准则,从而建立岩石的统计损伤本构模型^[7-9]。李西蒙等^[10]在单轴分级加-卸载作用的研究中建立了循环加-卸载条件下轴向应变与循环次数之间的理论模型,并且通过逆函数实现了对岩石疲劳寿命的预测。曹文贵等^[11]在岩石本构模型研究中基于 Weibull 公式对岩石的损伤模型进行了研究,将概率分布公式应用到岩石损伤力学中,通过大量的试验验证了其合理性与正确性,并且在工程实际中得到了应用。张平阳等^[12]通过在循环加-卸载岩石本构模型中引入内疲劳的变形模量公式,提出了一种新的能够描述岩石循环加-卸载的本构模型。邓华锋等^[13]发现能量耗散率与残余应变的相关性,为循环加-卸载中岩石能量参数的准确计算提供了较好的思路。刘树新等^[14]基于岩石裂纹三重分布的特征,引入不均匀系数,对 Weibull 分布下的岩石参数确定方法进行了研究,明确了参数的物理意义和确定方法。以上研究都是关于单轴循环加-卸载或低围压下循环加-卸载研究,高围压下的研究则主要针对岩石渗水特性、能量演化、破坏机制以及声发射等^[15-18],较少涉及高围压

* 收稿日期: 2019-07-11; 修回日期: 2019-07-26

基金项目: 国家自然科学基金(51404013)

作者简介: 刘之喜(1992—), 男, 硕士, 主要从事岩石非线性力学及能量演化研究. E-mail: 17355486579@163.com

下岩石循环加-卸载本构模型。对于高地应力和周期荷载作用下岩石表现的非线性力学特性,使用传统的强度准则已无法进行描述和表征,因此高围压下岩石循环加-卸载损伤本构模型研究具有一定的工程意义。

目前关于岩石的 Weibull 分布的本构模型,都是对单轴压缩下或常规三轴压缩下的本构模型描述,并且均假设岩石微元破坏服从某一强度准则,但是以最大正应力理论、最大正应变理论、最大剪应力理论、八面体剪应力理论、D-P 准则以及摩尔库仑准则建立的 Weibull 分布,均假设岩石为连续的均匀介质,这些强度准则的建立都与岩石的实际情况不相符。Griffith 认为岩石内部存在着许多细微裂隙,在外部荷载作用下细微裂隙产生应力集中现象,致使裂纹扩展引起破坏,因此 Griffith 准则建立在普遍适用的能量概念和含有裂纹的物体之上,突破了传统的局部分析方法。本研究通过对 Weibull 建立的统计损伤本构进行扩展,基于裂纹数服从 Weibull 分布以及裂纹扩展服从 Griffith 强度准则,建立一种能够表示高围压下岩石循环加-卸载统计损伤本构模型;对本构的损伤阈值进行研究,基于砂岩在高围压下偶数次循环加-卸载曲线,对岩石的参数演化规律进行分析,进一步利用奇数次循环的应力-应变曲线与本构理论值进行对比,进而验证本构模型的正确性与精确性。

1 岩石本构模型

由曹文贵等^[1]关于岩石统计损伤理论的研究,岩石的损伤本构关系为

$$\sigma_i = E\varepsilon_i(1 - D) + \mu(\sigma_j + \sigma_k) \quad (1)$$

式中: E 为材料弹性模量; σ_i 为名义应力, σ_i 、 σ_j 、 σ_k 为主应力 ($i, j, k = 1, 2, 3$); ε_i 为应变; μ 为泊松比; D 为损伤变量,对于微裂纹各向同性分布的情况,损伤变量可采用标量形式;对于微裂纹有规律地平面分布的情况,可用与裂纹垂直的矢量表示损伤;对于微裂纹各向异性分布的情况,损伤变量可采用张量形式。以 Griffith 准则描述岩石裂纹扩展强度,说明裂纹服从各向异性分布,因此损伤变量可以是张量。目前在岩石损伤本构模型研究中主要考虑最大主应力方向的应力-应变关系,并且用张量表示损伤时,虽然能够更真实地反映微观裂纹的排列状态及其力学特性,但是其数学表达式比较复杂,在工程应用方面存在较大难度,所以本研究中的损伤变量使用标量形式。

研究表明,单位体积岩石裂纹数服从随机分布^[9]。根据 Griffith 准则,当裂纹拉应力超过该点抗拉强度时,裂纹就会扩展,导致试件破坏。岩石加载过程往往是新裂纹生成、扩展和旧裂纹扩展的过程。基于上述研究,令裂纹扩展服从 Griffith 准则,设加载过程中裂纹扩展数为 n ,破坏时裂纹扩展总数为 N ,则可以把损伤变量 D 定义为 n 与 N 的比值, $n=0$ 时岩石无损伤产生, $n=N$ 时裂纹全部张开,岩石破坏。因此做出以下假设: (1) 材料内部存在众多互不影响的裂纹,忽略材料局部特性的变化; (2) 裂纹三维空间形状和裂缝平面内应力的影响忽略不计; (3) 从初始加载到损伤阈值处都是弹性阶段。

根据 Weibull 分布,损伤变量 D 的表达式^[16]为

$$D = \int_0^F P(x) dx \quad (2)$$

式中: $P(x)$ 表示岩石损伤变量的密度函数, $P(F) = \frac{m}{F_0} \left(\frac{F}{F_0} \right)^{m-1} \exp \left[- \left(\frac{F}{F_0} \right)^m \right]$, 其中 F_0 、 m 为本构模型参数。

在高围压下岩石的最大主应力与最小主应力均为正值,所以 $\sigma_1 + 3\sigma_3 > 0$, 其中: σ_1 为最大主应力; σ_3 为最小主应力,与围压 σ_m 相等,其中围压是不变的。因此在高围压下 Griffith 破坏准则为

$$\sigma_t = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2}{8(\sigma_1 + \sigma_3)} \quad (3)$$

式中: σ_t 为应力集中处裂纹扩展的拉应力。故在 Griffith 准则下岩石的裂纹张开强度为

$$F = \frac{(\bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_3)^2}{8(\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_3)} \quad (4)$$

式中: $\bar{\sigma}_1$ 、 $\bar{\sigma}_3$ 为损伤变量修正后的名义最大主应力和名义最小主应力。其中

$$\bar{\sigma}_i = \frac{\sigma_i}{1-D} \quad (5)$$

将式(4)代入式(2), 可得

$$D = 1 - \exp \left\{ - \left[\frac{(\bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_3)^2}{8F_0(\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_3)} \right]^m \right\} \quad (6)$$

将式(6)再代入式(1), 可得其本构模型的表达式为

$$\sigma_1 = E\varepsilon_1 \exp \left\{ - \left[\frac{(\bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_3)^2}{8F_0(\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_3)} \right]^m \right\} + 2\mu\sigma_3 \quad (7)$$

Weibull 分布的概率公式的损伤变量表达式中存在损伤变量, 使得本构模型无法使用数据处理软件进行拟合, 本研究将基于 Weibull 分布的本构模型进行简单变换, 消去损伤变量表达式中的损伤变量, 并对本构进行等式变换。

将式(7)变换可得

$$\frac{\sigma_1 - 2\mu\sigma_3}{E\varepsilon_1} = \exp \left\{ - \left[\frac{(\bar{\sigma}_1 - \bar{\sigma}_3)^2}{8F_0(\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_3)} \right]^m \right\} = 1-D \quad (8)$$

根据式(5), 将式(6)由含损伤变量的名义主应力表达式转换成由主应力和损伤变量共同描述的岩石裂纹张开强度

$$F = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2}{8(\sigma_1 + \sigma_3)(1-D)} \quad (9)$$

将式(8)代入式(9), 消去损伤变量, 可得

$$F = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2 E\varepsilon_1}{8(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 - 2\mu\sigma_3)} \quad (10)$$

将式(10)代入本构方程式(7), 可得

$$\sigma_1 = E\varepsilon_1 \exp \left\{ - \left[\frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2 E\varepsilon_1}{8F_0(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 - 2\mu\sigma_3)} \right]^m \right\} + 2\mu\sigma_3 \quad (11)$$

2 循环加-卸载试验

图 1 为张媛等^[15]获得的高围压下岩石循环加-卸载试验曲线。张媛等^[15]进行了围压分别为 20、40、60 MPa 时的三轴循环加-卸载试验, 每次加载的围压都相同, 轴向荷载采用应力控制方式, 加载波形为三角波。每次循环的加载上限为岩石强度的 70%, 下限为岩石强度的 25%。砂岩的弹性模量为 45 GPa, 泊松比为 0.142。从其使用数学模型得到的拟合曲线中, 可以获得每个循环中岩石的应力-应变曲线。本研究使用高围压循环加-卸载岩石本构模型, 对张媛等^[15]获得的试验数据进行拟合。

3 损伤阈值确定及本构模型参数拟合

3.1 损伤阈值的确定

为了研究本构模型的适用范围, 需要根据高围压下循环加-卸载应力-应变曲线和本构模型, 对岩石的损伤变量进行探讨, 以此确定岩石的损伤阈值, 确定本构模型的使用范围。将式(1)进行等式变换,

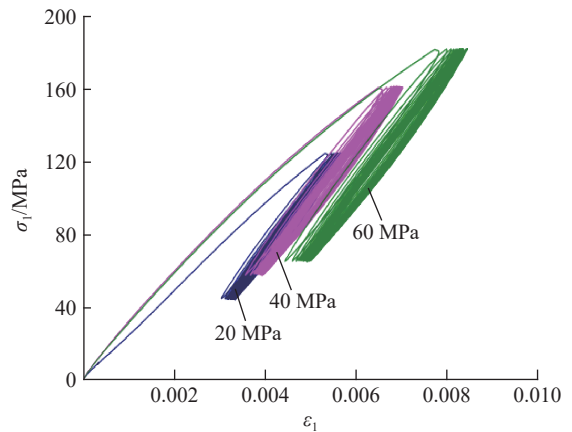


图 1 不同围压下 σ_1 - ε_1 曲线

Fig. 1 Axial stress-strain curves under different confining pressures

可得

$$D = \frac{E\varepsilon_i + \mu(\sigma_j + \sigma_k) - \sigma_i}{E\varepsilon_i} \quad (12)$$

在围压相等的高围压下,式(12)可变为

$$D = \frac{E\varepsilon_1 + 2\mu\sigma_3 - \sigma_1}{E\varepsilon_1} \quad (13)$$

当 $D=0$ 时,岩石不发生损伤;当 $D>0$ 时,岩石开始发生损伤,并且损伤是一个连续过程。将岩石参数代入式(13),可知砂岩在围压为 20、40、60 MPa 时发生损伤,应变值分别为 3.182×10^{-4} 、 6.364×10^{-4} 、 7.111×10^{-4} 。由图 1 可知:在应力较小处,岩石已经产生损伤,并且不同围压下循环下限的应变值均大于产生初始损伤时的应变阈值;随着围压增大,岩石的损伤阈值也随之增加,呈非线性增长。高围压下岩石本构模型产生损伤时的轴向应变值较小,即岩石的弹性阶段较短,从侧面反映了岩石在高围压下的非线性力学特征。

3.2 本构模型的参数拟合

通过推导得到了高围压下砂岩的本构模型,如式(11)所示。式(11)中包含 $\exp[-(F/F_0)^m]$ 形式,其中 F_0 、 m 需要通过拟合得到,且两个参数并不是相互独立的。一般采用 Levenberg Marquardt 算法对式(11)进行迭代。在使用 Levenberg Marquardt 算法进行迭代的过程中,如果对参数的拟合初值选取不当,容易造成本构无法拟合,为此对式(11)进行等式变换,变换后的形式为

$$y = F_0 x^{\frac{1}{m}} \quad (14)$$

式中: $y = \frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2 E \varepsilon_1}{8(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 - 2\mu\sigma_3)}$, $x = \ln \frac{E \varepsilon_1}{\sigma_1 - 2\mu\sigma_3}$, F_0 、 m 均为本构模型参数。与式(11)相比,式(14)在使用 Levenberg Marquardt 算法拟合的过程中,可以直接将两个拟合参数初值赋 1 进行迭代拟合,解决了拟合参数初值不易选取的问题。以下将以第 1 次加载阶段的参数拟合为例说明具体拟合过程。

图 2 为岩石在 60 MPa 围压下第 1 次加载时的应力-应变拟合曲线。从图 2 可以看出,第 1 次加载的拟合效果相对良好,并且将拟合得到的参数代入本构模型中时,能够较好地描述岩石的应力-应变曲线。

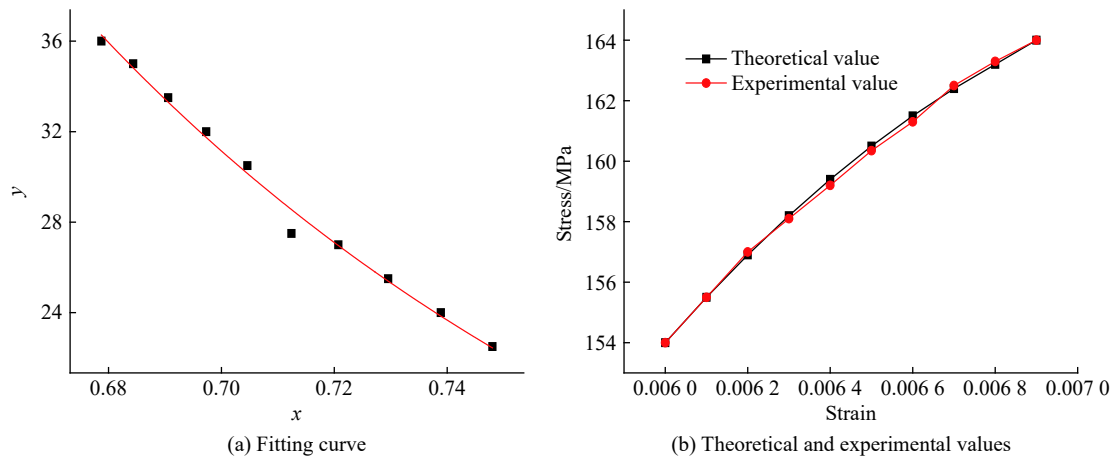


图 2 第 1 次循环加载曲线拟合及验证

Fig. 2 Curve fitting and verification of the first cyclic loading

本研究以围压为 60 MPa 时砂岩第 2、4、6、8、10 次循环加-卸载原始数据为例进行拟合,具体参数如表 1 所示,其中 M 为循环次数。拟合的校正系数均在 0.99 以上,说明拟合效果良好。

表 1 围压为 60 MPa 时本构模型参数

Table 1 Parameters of constitutive model with confining pressure of 60 MPa

M	Load parameters		Unload parameters	
	F_0	m	F_0	m
2	5.870 04	-0.202 98	21.330 95	-0.141 14
4	6.648 45	-0.216 03	23.502 82	-0.137 86
6	7.103 79	-0.222 77	24.513 79	-0.136 14
8	7.426 85	-0.229 51	25.231 08	-0.134 94
10	7.677 44	-0.231 40	26.171 96	-0.133 82

4 参数的演化规律及本构模型的验证

4.1 参数的演化规律及其物理意义

通过表 1 可以看出: 无论是加载阶段还是卸载阶段, 参数 F_0 均随着循环次数的提高呈非线性增长; 但是加载参数 m 在加载阶段随着循环次数的增加而逐渐减小, 在卸载阶段随着循环次数的增加而增大。图 3 显示了循环加-卸载本构参数的演化规律。

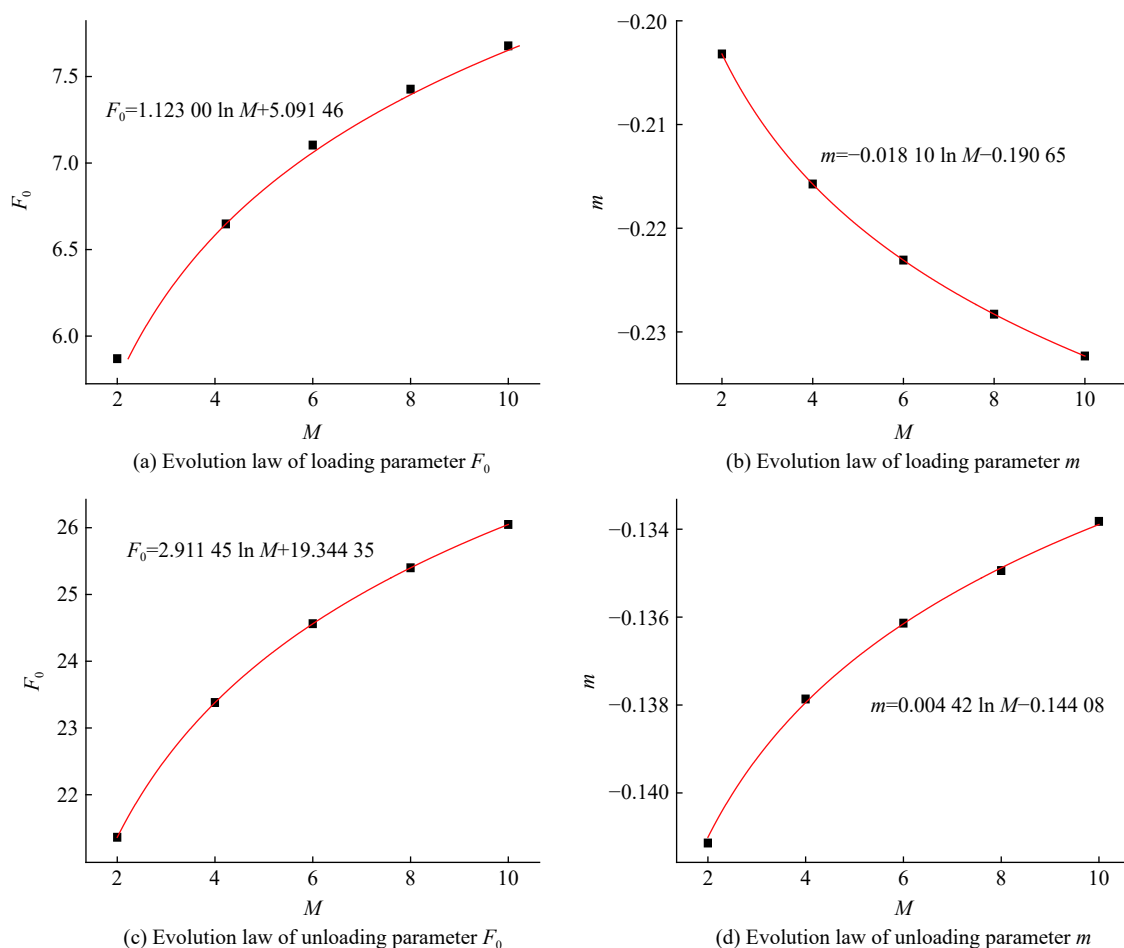


图 3 循环加-卸载本构参数演化规律

Fig. 3 Evolution of cyclic loading and unloading constitutive parameters

在同一组数据中, 只有循环次数是不断变化的, 使用数据处理软件进行拟合后发现, 参数的演化趋势服从

$$y = a \ln M + b \quad (15)$$

式中: a 、 b 表示拟合参数, M 表示循环次数。

从图 3(a)、图 3(c) 拟合得到的参数演化规律可以看出, 随着循环次数的增多, 无论是加载还是卸载, 参数 F_0 都随着加载次数的增多呈逐渐上升趋势。根据第 1 节推导过程中的假设, 参数 F_0 与裂纹扩展的强度有关, 参数 m 与岩石裂纹分布有关。随着加载次数增多, 岩石逐渐硬化, 岩石裂纹扩展时所需的强度逐渐增高, 说明参数 F_0 越大, 岩石裂纹扩展需要的强度越大, 岩石的硬化度越高。岩石并非通常假设的各向同性均质体, 其内部存在许多细微裂纹, 因此施加外部荷载时, 岩石中的部分微裂纹会闭合, 当荷载增加到一定程度时, 部分闭合的裂纹开始扩展, 新裂纹生成、扩展。由于裂纹间并非光滑, 存在界面摩擦, 随着循环次数增多, 部分可张开的裂纹在荷载作用下闭合所需克服的摩擦力减小, 所以随着循环次数增多, 在荷载作用下旧裂纹扩展、新裂纹生成及扩展越多, 并且部分原始裂纹闭合也越多。新裂纹生成及扩展需要的力远远大于原始裂纹闭合需要克服的摩擦力, 所以在加载阶段新裂纹生成及扩展数相比原始裂纹闭合的裂纹数要少。在卸载阶段, 由于荷载减小, 部分闭合的裂纹逐渐张开, 而扩展的裂纹和新增裂纹扩展部分并不会因为外部荷载的减小而闭合, 所以参数 m 呈上升趋势; 而在加载阶段, 由于在荷载作用下闭合的原始裂纹较多, 所以整体呈下降趋势。基于上述分析, 可以认为, 本构参数 m 与裂纹扩展数呈正相关, 裂纹张开数越多, 参数 m 越大。

4.2 参数与围压的关系

为了便于应用岩石循环加-卸载本构模型, 对围压与岩石参数之间的关系进行了研究, 见图 4。

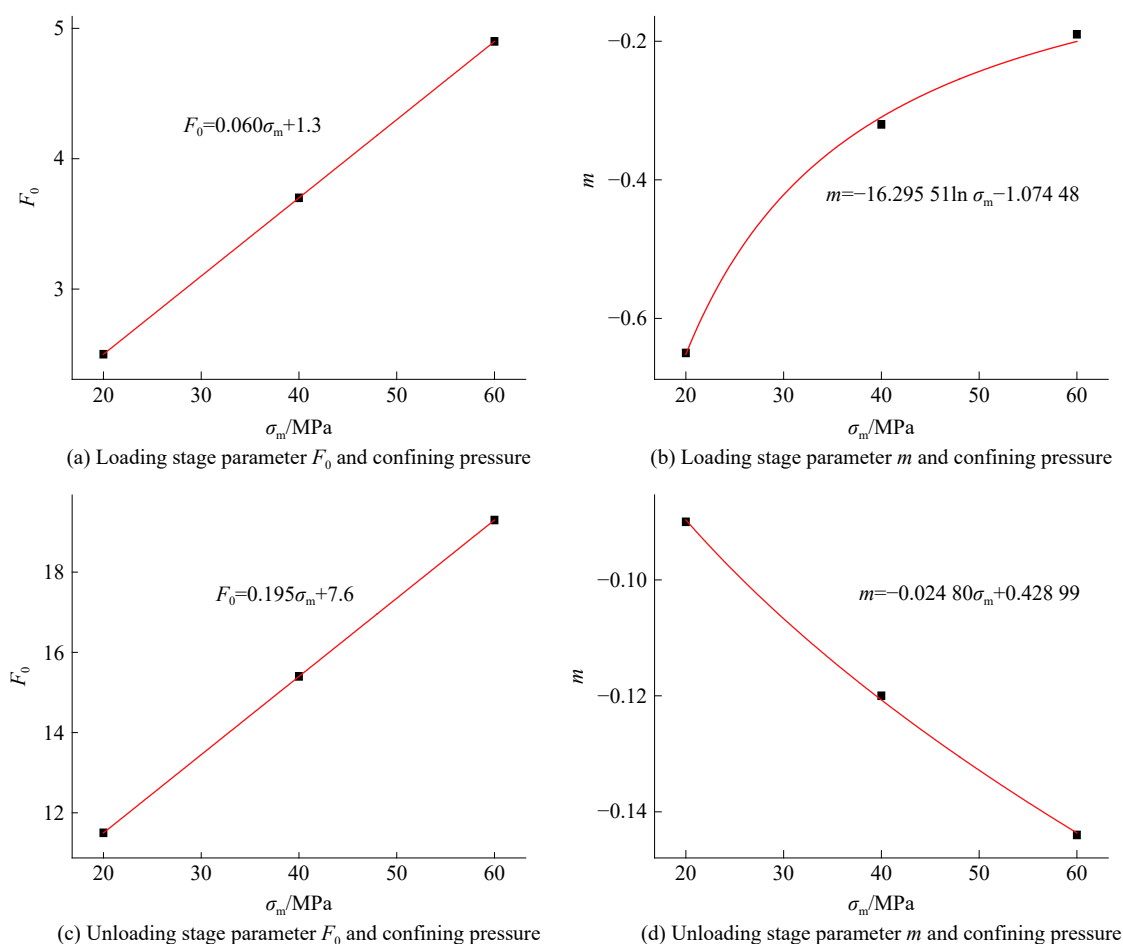


图4 围压与本构模型参数的关系

Fig. 4 Relationship between confining pressure and constitutive model parameters

图 4 中参数 σ_m 表示围压大小。通过对不同围压下本构模型参数的演化规律进行分析可以发现, 参数 F_0 与围压的大小呈线性关系, 参数 m 与围压的大小呈非线性关系。利用围压与参数的关系可以得出第 1 次加-卸载参数, 进而得到对应围压下岩石参数的演化规律, 对于深部岩石在长期周期荷载作用下的变形预测具有一定的借鉴意义。

4.3 本构模型的验证

基于参数的演化规律, 将式 (15) 代入式 (11), 可以得到高围压下岩石的统计损伤本构模型

$$\sigma_1 = E\varepsilon_1 \exp \left\{ - \left[\frac{(\sigma_1 - \sigma_3)^2 E \varepsilon_1}{8(C \ln M + D)(\sigma_1 + \sigma_3)(\sigma_1 - 2\mu\sigma_3)} \right]^{A \ln M + B} \right\} + 2\mu\sigma_3 \quad (16)$$

式中: A 、 B 、 C 、 D 均为本构模型参数, 加载阶段的参数与卸载阶段的参数不相同, 加载阶段 A 、 B 、 C 、 D 的具体数值如图 3(a)、图 3(b) 所示, 卸载阶段的参数数值如图 3(c)、图 3(d) 所示。如果将拟合得到的参数代入本构模型中对理论值与原始数据只能说明拟合的效果, 而不能表明本构模型的正确性。为此基于上述偶数次加载参数的拟合公式, 求出奇数次循环的参数值, 将奇数次循环的参数代入本构模型中得出本构的理论值。通过对比加-卸载曲线的原始数据与本构对应的理论值来验证本构模型的正确性, 如图 5 所示。

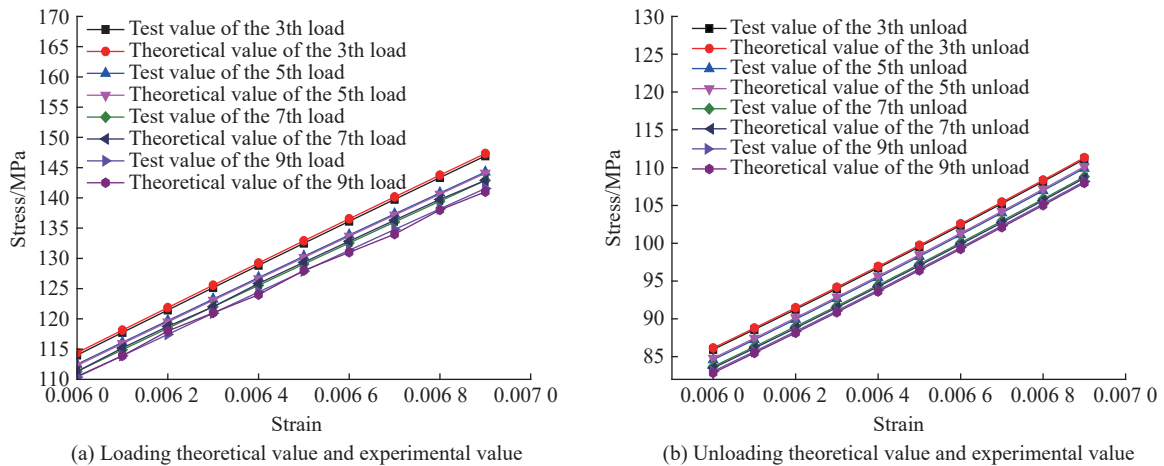


图 5 奇数次循环的加-卸载曲线理论值与原始数据对比

Fig. 5 Comparison of theoretical values of loading and unloading curves with original data for odd cycles

对比理论值与原始数据发现, 基于 Griffith 准则的统计损伤本构模型能够较好地描述和表征高围压下岩石循环加-卸载应力-应变曲线, 说明了本构模型的合理性及正确性。对于围压为 20、40 MPa 的循环加-卸载, 采用同样的方法进行研究, 除了 F_0 、 m 的大小不同, 不同循环下的参数演化规律也服从式 (15), 故在此不再一一列举。以 Griffith 准则建立的本构模型理论值与高围压下岩石变形的试验值较吻合, 从而为描述岩石在高围压下的应力-应变曲线提供了新的思路。

5 结 论

(1) 根据 Griffith 准则, 岩石内部存在许多细微裂纹, 岩石破坏是由于裂纹的扩展。已有的研究也表明, 岩石内部裂纹数服从 Weibull 分布。因此, 基于 Griffith 准则建立的统计损伤本构模型与岩石的实际情况更相符。该模型参数少, 参数演化规律明确, 且便于拟合。该研究方法对高围压下受周期荷载作用的岩石变形预测具有一定借鉴意义。

(2) 通过本构模型的等式变换, 确定了不同围压下岩石的损伤阈值, 损伤阈值处的轴向应变值较小, 并且不同围压下产生损伤时的应变值随着围压增大呈现非线性增长。

(3) 对本构模型参数的演化规律进行分析发现: 参数 F_0 与围压呈线性关系, 并且 F_0 与裂纹扩展强

度呈正相关性;参数 m 与裂纹张开数目相关,裂纹张开数目越多, m 越大;参数 F_0 随着围压的增大呈线性增长,参数 m 随围压的增加呈非线性增长。

(4)采用偶数次循环的加载和卸载曲线对本构参数进行分析,得到本构参数在不同循环次数和不同围压下的演化规律,由此计算出奇数次循环的加载和卸载曲线本构理论值,并与试验曲线对比,验证了本构模型的合理性和正确性。

参考文献:

- [1] 王伟,田振元,朱其志,等.考虑残余应力的砂岩损伤理论模型[J].岩石力学与工程学报,2015,34(Suppl 2): 3676–3682.
WANG W, TIAN Z Y, ZHU Q Z, et al. Study of statistical damage constitutive model for rock considering waterpressure [J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2015, 34(Suppl 2): 3676–3682.
- [2] 刘涛,杨鹏,吕文生,等.岩石在不同应力幅值下受低频循环扰动的力学特性试验[J].煤炭学报,2017,40(9): 2280–2286.
LIU T, YANG P, LÜ W S, et al. Rock mechanical properties experiments with low-frequency circulation disturbance under different stress amplitudes [J]. Journal of China Coal Society, 2017, 40(9): 2280–2286.
- [3] 何明明,陈蕴生,李宁,等.单轴循环荷载作用下砂岩变形特性与能量特征[J].煤炭学报,2015,40(8): 1805–1812.
HE M M, CHEN Y S, LI N, et al. Deformation and energy characteristics of sandstone subjected to uniaxial cyclic loading [J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(8): 1805–1812.
- [4] 姚强岭,刘亚鹏,陈田,等.地下水库人工坝体强度损伤演化特征试验研究[J].煤炭学报,2018,43(4): 1111–1117.
YAO Q L, LIU Y P, CHEN T, et al. Experimental study of damage evolution of artificial dam strength of underground reservoir [J]. Journal of China Coal Society, 2018, 43(4): 1111–1117.
- [5] 谢和平,高峰,鞠杨,等.深部开采的定量界定与分析[J].煤炭学报,2015,40(1): 1–10.
XIE H P, GAO F, JU Y, et al. Quantitative definition and investigation of deep mining [J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(1): 1–10.
- [6] DEHLER W, LABUZ J F. Stress path testing of an anisotropic sandstone [J]. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2007, 133(1): 116–119.
- [7] 王者超,赵建纲,李术才,等.循环荷载作用下花岗岩疲劳力学性质及其本构模型[J].岩石力学与工程学报,2012,31(9): 1888–1900.
WANG Z C, ZHAO J G, LI S C, et al. Fatigue mechanical behavior of granite subject to cyclic load and its constitutive model [J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2012, 31(9): 1888–1900.
- [8] 易其康,马林建,刘新宇,等.考虑频率影响的盐岩变参数蠕变损伤模型[J].煤炭学报,2015,40(Suppl 1): 93–99.
YI Q K, MA L J, LIU X Y, et al. A variable parameters-based creep damage model considering the effect of frequency for rock salt [J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(Suppl 1): 93–99.
- [9] 霍润科,李宁,刘汉东.受酸腐蚀砂岩的统计本构模型[J].岩石力学与工程学报,2005,24(11): 1852–1856.
HUO R K, LI N, LIU H D. Statistical constitutive model of sandstone subjected to hydrochloric acid attack [J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2005, 24(11): 1852–1856.
- [10] 李西蒙,刘长友,鲁岩,等.单轴分级循环加载条件下砂岩疲劳变形特性与损伤模型研究[J].中国矿业大学学报,2017,46(1): 8–16.
LI X M, LIU C Y, LU Y, et al. Fatigue deformation characteristics and damage model of sandstone subjected to uniaxial step cyclic loading [J]. Journal of China University of Mining and Technology, 2017, 46(1): 8–16.
- [11] 曹文贵,张升.基于Mohr-Coulomb准则的岩石损伤统计分析方法研究[J].湖南大学学报(自然科学版),2005,32(1): 43–47.
CAO W G, ZHANG S. Study on the statistical analysis of rock damage based on Mohr-Coulomb criterion [J]. Journal of Hunan University (Natural Sciences), 2005, 32(1): 43–47.
- [12] 张平阳,夏才初,周舒威,等.循环加-卸载岩石本构模型研究[J].岩土力学,2015,36(12): 3354–3359.
ZHANG P Y, XIA C C, ZHOU S W, et al. Constitutive model for rock under cyclic loading and unloading [J]. Rock and Soil Mechanics, 2015, 36(12): 3354–3359.
- [13] 邓华锋,胡玉,李建林,等.循环加卸载过程中砂岩能量耗散演化规律[J].岩石力学与工程学报,2016,35(Suppl 1): 2869–2875.

- DENG H F, HU Y, LI J L, et al. The evolution of sandstone energy dissipation under cyclic loading and unloading [J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2016, 35(Suppl 1): 2869–2875.
- [14] 刘树新, 刘长武, 韩小刚, 等. 基于损伤多重分形特征的岩石强度 Weibull 参数研究 [J]. 岩土工程学报, 2011, 33(11): 1786–1791.
- LIU S X, LIU C W, HAN X G, et al. Weibull distribution parameters of rock strength based on multi-fractal characteristics of rock damage [J]. Chinese Journal of Geotechnical Engineering, 2011, 33(11): 1786–1791.
- [15] 张媛, 许江, 杨红伟, 等. 循环荷载作用下围压对砂岩滞回环演化规律的影响 [J]. 岩石力学与工程学报, 2011, 30(2): 320–326.
- ZHANG Y, XU J, YANG H W, et al. Effect of confining pressure on evolution law of hysteresis loop of sandstone under cyclic loading [J]. Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2011, 30(2): 320–326.
- [16] 赵永川, 杨天鸿, 肖福坤, 等. 西部弱胶结砂岩循环载荷作用下塑性应变能变化规律 [J]. 煤炭学报, 2015, 40(8): 1813–1819.
- ZHAO Y C, YANG T H, XIAO F K, et al. The variation law of plastic strain energy of western weak cemented sandstone during cyclic loading experiment [J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(8): 1813–1819.
- [17] 何俊, 潘结南, 王安虎. 三轴循环加卸载作用下煤样的声发射特征 [J]. 煤炭学报, 2014, 39(1): 84–90.
- HE J, PAN J N, WANG A H. Acoustic emission characteristics of coal specimen under triaxial cyclic loading and unloading [J]. Journal of China Coal Society, 2014, 39(1): 84–90.
- [18] 丁长栋, 张杨, 杨向同, 等. 致密砂岩高围压和高孔隙水压下渗透率演化规律及微观机理研究 [J]. 岩土力学, 2019, 40(9): 15–23.
- DING C D, ZHANG Y, YANG X T, et al. Permeability evolution of tight sandstone under high confining pressure and high pore pressure and its microscopic mechanism [J]. Rock and Soil Mechanics, 2019, 40(9): 15–23.

Damage Constitutive of Cyclic Loading and Damage Threshold of Rock under High Confining Pressure

LIU Zhixi

(School of Civil Engineering and Architecture, Anhui University of
Science and Technology, Huainan 232001, Anhui, China)

Abstract: In the process of deep roadway excavation, the rock mass is subjected to periodic load and high geostress, so the general strength criterion cannot describe the stress-strain curve of rock. However, the cyclic loading and unloading constitutive model of rock under high geostress is the key to predict the long-term stability of deep roadway under periodic load, thus it is urgent to carry out the study of rock constitutive model under high confining pressure. The process of rock subjected to external load to failure presents the propagation of original cracks, growth and propagation of new crack. Previous studies have shown that the number of cracks in rock obeys Weibull distribution and the Griffith criterion assumes that the failure of rock is caused by the crack propagation. Based on these criteria, this paper establishes a statistical damage constitutive theory of cyclic loading and unloading of rock under high confining pressure by extending Weibull statistical damage constitutive. Through the equation transformation of constitutive model, the threshold value of constitutive damage is studied. Furthermore, the constitutive parameters was fitted with the data of even cyclic loading and unloading test, and the evolution rule of the parameters is obtained. By comparing the constitutive theory with the odd cyclic loading and unloading test, the accuracy of the constitutive model is verified, which provides a new insight for the study of the constitutive model of rock under high confining pressure.

Keywords: high confining pressure; cyclic loading and unloading; constitutive model; damage threshold

冲击荷载对无烟煤微观孔隙影响的分形研究

王以贤^{1,2}, 梁为民¹

(1. 河南理工大学土木工程学院, 河南 焦作 454000;

2. 河南建筑职业技术学院, 河南 郑州 450064)

摘要: 为了揭示冲击荷载对无烟煤微观孔隙结构的影响规律, 利用分离式霍普金森压杆 (SHPB) 冲击实验系统模拟了冲击应力在不同衰减过程中的冲击波和应力波, 基于冲击前后压汞实验及低温液氮实验测试数据, 运用分形理论, 研究了赵固二矿不同方向煤体 (与层理方向分别呈垂直、平行、45°斜交) 冲击前后孔隙结构的分形特征。结果表明: 对于渗流孔, 冲击荷载提高了瓦斯的渗流与运移速度, 对于吸附孔, 冲击荷载减小了吸附孔的吸附能力, 促进了瓦斯的解吸; 分形维数具有明显的冲击方向性, 且吸附孔的分形维数明显小于渗流孔; 不同方向无烟煤的最佳冲击荷载不同, 垂直和斜交层理方向的最佳冲击荷载为 51.80 MPa, 平行层理方向的最佳冲击荷载为 28.46 MPa。研究结果可为冲击荷载促进瓦斯抽采机理的探讨提供参考。

关键词: 冲击荷载; 无烟煤; 分形理论; 微观孔隙; 压汞; 低温液氮

中图分类号: O347.2

文献标识码: A

煤体孔隙是煤层气 (煤矿瓦斯) 赋存、扩散、运移的主要场所^[1]。通过外部扰动优化煤体孔径配置、改善煤体孔隙结构是促进煤层气解吸、增强煤层气扩散和运移的主要手段。目前, 通过外部扰动改善煤体孔隙结构主要有 3 种方式: (1) 流体冲载, 主要包括水力、高能气体压裂等^[2-3]; (2) 物理场激励, 主要有静电场、交变电场、电磁场、声场激励等^[4-5]; (3) 冲击荷载, 如爆破^[6-7]、脉冲冲击波^[8]等。

我国无烟煤煤层气储层孔隙主要发育在纳米级别^[9], 煤层气含量高, 但吸附性强、渗透率低, 制约着我国煤层气的产量。因此, 要实现煤层气的有效开采, 需要在了解煤体微观孔隙形态与分布的基础上, 深入探讨外载促进煤体孔隙改变及增强瓦斯渗透性的机理。目前, 对于煤体微观孔隙结构的研究大多是针对自然状态下的不同类型煤体, 对于冲击荷载作用下煤体微观孔隙结构的研究还鲜见报道。

分形几何学是由 Mandelbrot 等^[10]于 1982 年提出和建立的, 该理论能够为研究复杂的不规则事物的变化规律提供强有力的工具和途径。大量科研人员应用分形理论研究了土和岩石的孔隙分形^[11-13], 并得出了不同岩性的孔隙度、比表面积、吸附性及孔隙表面粗糙度、不均匀性等与分形维数的定量关系^[14-17], 而对于煤体孔隙, 特别是外载扰动后煤体孔隙的分形研究相对较少。事实上煤体是具有基质孔隙和裂隙的多孔介质, 其复杂的孔隙结构满足自相似性, 符合分形几何规律^[18-20]。因此, 可以将分形参数作为煤体内部复杂孔隙结构的定量表征^[21-22], 通过对比煤体受载前后的分形参数, 探讨煤体外载作用对其孔隙结构的影响规律。

本研究利用霍普金森冲击实验系统 (SHPB) 模拟冲击应力在不同衰减过程中的冲击波和应力波, 对赵固二矿无烟煤实施不同方向 (分别与层理呈垂直、平行、45°斜交方向)、不同速度的冲击加载, 利

* 收稿日期: 2020-03-12; 修回日期: 2020-03-26

基金项目: 国家自然科学基金 (41772163)

作者简介: 王以贤 (1981-), 男, 博士研究生, 讲师, 主要从事爆破工程及岩土工程研究。

E-mail: 56653648@qq.com

通信作者: 梁为民 (1967-), 男, 博士, 教授, 主要从事爆破工程及岩土工程研究。

E-mail: liangwm@hpu.edu.cn

用压汞实验及低温液氮实验测试数据,对冲击前后无烟煤的微观孔隙进行分形研究,力图得出冲击荷载对无烟煤微观孔隙的破坏特征及规律,以期冲击荷载促进瓦斯抽采规律的研究提供参考。

1 样品制备与实验过程

1.1 样品制备

实验样品取自河南省焦作矿区赵固二矿,属于无烟煤,其显微组分、工业分析结果及基本力学参数如表 1 所示,其中: C、P、X 分别表示垂直、平行、45°斜交层理的煤样,下标 0 代表冲击前原煤样, ρ 为样品密度, f_c 为单轴抗压强度, C_L 为纵波声速, $R_{0,max}$ 为最大镜质组反射率。为了尽量减小煤样间的差异,在矿井采煤工作面同一煤层同一地点采集大块完整煤岩。按照 GB/T50266—2013《工程岩体实验方法标准》^[23] 及 GB/T23561.7—2009《煤和岩石物理力学性质测定方法》^[24] 钻取直径和高度均为 50 mm 的圆柱体,如图 1 所示。利用双端面磨床打磨试件,确保煤样两端面的平整度小于或等于 0.05 mm,两端面平行度小于或等于 0.02 mm。

表 1 煤样基本参数

Table 1 Basic parameters of coal samples

No.	$\rho/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	f_c/MPa	$C_L/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	$R_{0,max}/\%$	Mass fraction/%					
					Ash	Volatile component	Fixed carbon	Exinite	Vitrinite	Inertinite
C ₀	1.423	17.29	1.381							
P ₀	1.461	15.13	1.852	3.32	5.62	6.05	83.98	1	98	1
X ₀	1.422	11.65	1.653							

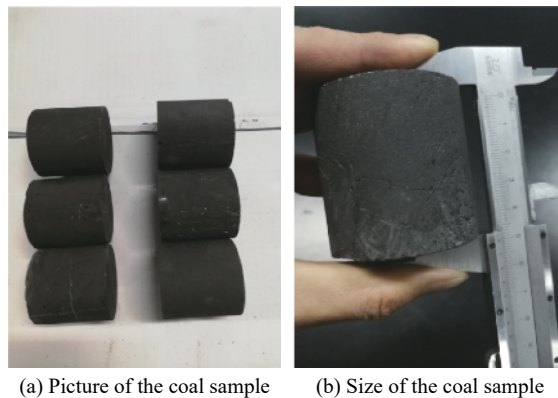


图 1 煤样图片及尺寸

Fig. 1 Picture and size of the coal sample

1.2 实验方案与步骤

本实验方案如图 2 所示。实验步骤分为 4 部分。

(1) SHPB 冲击实验。采用入射杆和透射杆均为变截面杆的 SHPB 冲击实验系统,杆端直径均为 50 mm,入射杆长 2 400 mm,透射杆长 1 200 mm,杆件材质为钢材,密度为 7 800 kg/m³,弹性波速为 5 190 m/s,弹性模量为 210 GPa。根据冲击波(应力波)随距离衰减规律,结合样品的基本力学参数及试冲情况,设定冲击气压 p_1 分别为 0.10、0.15、0.20、0.30 和 0.50 MPa,利用河南理工大学土木工程学院的 SHPB 冲击加载系统进行冲击加载实验。首先,调整子弹、入射杆、透射杆呈一条直线,将试件涂抹耦合剂以后装在入射杆与透射杆之间;其次,将尺寸为 1 cm × 1 cm 的铜整形片粘贴至入射杆靠近子弹一端,按照设定的冲击气压驱动子弹撞击入射杆;最后,采集信号,保存数据。

(2) 取样并干燥处理。为了保证冲击前后压汞实验和低温液氮实验数据的可比性, 实验样品均取自冲击前后圆柱体中轴线附近的煤颗粒, 将实验样品放入烘干箱, 在 110 ℃ 条件下恒温干燥 8 h 以后放入干燥器皿中冷却至室温。

(3) 压汞实验。将 3 g 左右 4~6 mm 的煤颗粒放入膨胀计中, 抽真空以后将膨胀计装入低压站进行低压实验, 低压压汞实验结束后将膨胀计移入高压仓进行高压实验, 然后结合压汞分析软件记录数据。压汞仪采用美国麦克仪器公司 Autopre IV 9520 型全自动压汞仪, 工作压力介于 0.1~60 000.0 psi (1 psi=0.006 895 MPa), 测定孔径范围为 3 nm~1 100 μm。

(4) 低温液氮实验。将 3 g 左右 60~80 目的煤粉脱气 8 h 后放入分析站进行低温液氮吸附实验。低温液氮仪为美国麦克仪器公司 TriStar II 3020 型全自动比表面积与孔隙度分析仪, 测定孔径范围为 0.35~500 nm。

本实验的孔径划分采用 Hodot 的十进制划分法^[25], 即微孔、小孔、中孔、大孔对应的孔径依次为小于 10 nm、介于 10~100 nm 之间、介于 100~1 000 nm 之间、大于 1 000 nm。

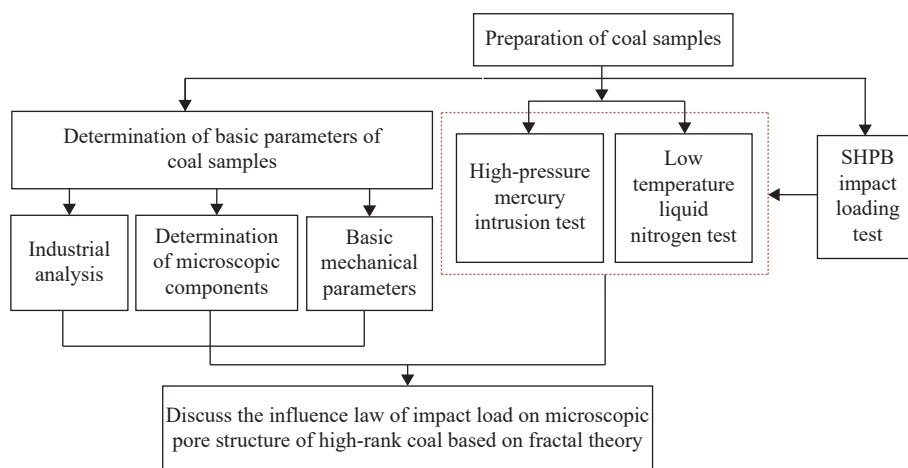


图 2 实验方案

Fig. 2 Experimental scheme

2 实验结果与分析

2.1 SHPB 冲击实验

根据一维弹性应力波和应力均匀的假设, 采用三波法^[26-27] 计算煤样的动态应力、应变及应变率。子弹以一定速度冲击入射杆撞击试件, 首先使试件产生应力、应变并对试件造成一定的损伤, 然后形成透射波, 最后由吸收系统吸收透射波。该过程中能量传递和转化的表达式为

$$W = \frac{A_c}{E} \int \sigma^2 dt = A_0 E c \int \varepsilon^2 dt \quad (1)$$

$$w = W/V \quad (2)$$

式中: W 、 σ 、 ε 分别为 3 种波对应的能量、应力和应变, V 为试样体积, A_0 为压杆的横截面积, E 为弹性模量, c 为波速。

损伤是外界能量作用于物体的一种客观存在, 其量化指标为损伤变量, 一般来讲, 可以从面积、密度、弹性模量和能量等不同角度定义损伤变量。冲击能量对试件造成的损伤可以通过能量公式计算其损伤变量

$$d = w/u \quad (3)$$

式中: d 为损伤变量; u 为试件的总吸收能密度, 即试件的冲击应力-应变曲线所围成的面积, 表示为

$$u = \int \sigma d\epsilon \quad (4)$$

鉴于煤体的非均质性及各向异性, 同等实验条件下冲击 3 个试件, 取各个参数的平均值进行分析, 其中损伤变量为总耗散能密度与总吸收能密度的比值。

利用式(1)~式(4)可以计算出煤样受冲击后的损伤值^[28-30], 如表 2 所示, 其中: p_l 为冲击气压; p_L 为冲击荷载; 煤样尺寸为圆柱体的直径与高度; D_s 、 $\bar{D}_s$ 分别为渗流孔分形维数和渗流孔分形维数平均值; D_x 、 $\bar{D}_x$ 分别为吸附孔分形维数和吸附孔分形维数平均值; R_s^2 、 R_x^2 分别为渗流孔和吸附孔分形维数相关系数; d 、 $\bar{d}$ 分别为损伤变量和平均损伤变量; YC、YP、YX 分别代表冲击前垂直、平行和 45°斜交层理方向的煤样, 下标分别代表不同层理方向的煤样序号。原煤压汞实验和低温液氮实验中的煤样取自冲击前煤块颗粒, 不存在煤样尺寸。

表 2 实验数据表
Table 2 Impact test data

Direction	p_l/MPa	p_L/MPa	No.	Size/mm × mm	D_s	$\bar{D}_s$	R_s^2	D_x	$\bar{D}_x$	R_x^2	d	$\bar{d}$
Vertical bedding	0	0	YC ₁		2.99		0.97	2.75		0.95		
			YC ₂		2.99	2.98	0.99	2.78	2.78	0.96		
			YC ₃		2.95		0.98	2.81		0.98		
	0.10	28.46	C ₁	∅49.75 × 50.33	2.85		0.95	2.31		0.95	0.14	
			C ₂	∅49.33 × 49.89	2.92	2.85	0.96	2.21	2.23	0.93	0.16	0.14
			C ₃	∅49.34 × 50.42	2.79		0.95	2.17		0.96	0.12	
	0.15	32.59	C ₄	∅49.42 × 49.57	2.73		0.99	2.19		0.95	0.18	
			C ₅	∅49.66 × 49.93	2.78	2.73	0.97	2.23	2.19	0.96	0.12	0.16
			C ₆	∅49.42 × 50.84	2.69		0.94	2.15		0.95	0.18	
	0.20	41.43	C ₇	∅49.39 × 49.93	2.63			2.05		0.96	0.18	
			C ₈	∅49.42 × 49.76	2.71	2.68	0.98	2.21	2.13	0.97	0.17	0.17
			C ₉	∅49.45 × 50.28	2.69		0.99	2.13		0.98	0.15	
	0.30	51.80	C ₁₀	∅49.52 × 50.47	2.56		0.99	2.05		0.99	0.17	
			C ₁₁	∅49.36 × 49.78	2.64	2.51	0.96	2.09	2.05	0.96	0.19	0.19
			C ₁₂	∅49.27 × 50.27	2.34		0.94	2.01		0.96	0.22	
Parallel bedding	0	0	C ₁₃	∅49.38 × 50.47	2.74		0.92	2.11		0.92	0.33	
			C ₁₄	∅49.45 × 50.21	2.79	2.73	0.94	2.17	2.12	0.93	0.57	0.44
			C ₁₅	∅49.49 × 49.44	2.67		0.95	2.07		0.98	0.42	
	0.10	28.46	YP ₁		2.84		0.99	2.89		0.95		
			YP ₂		2.91	2.87	0.96	2.86	2.86	0.94		
			YP ₃		2.87		0.97	2.83		0.96		
	0.15	32.59	P ₁	∅49.29 × 50.11	2.57		0.99	2.03		0.98	0.13	
			P ₂	∅49.36 × 50.37	2.65	2.57	0.98	2.05	2.03	0.95	0.11	0.13
			P ₃	∅49.47 × 49.88	2.50		0.99	2.02		0.96	0.15	

表 2 (续)
Table 2 (Continued)

Direction	p_f/MPa	p_L/MPa	No.	Size/mm $\times$ mm	D_s	$\bar{D}_s$	R_s^2	D_x	$\bar{D}_x$	R_x^2	d	$\bar{d}$
Parallel bedding	0.20	41.43	P ₇	$\varnothing 49.33 \times 50.33$	2.64		0.92	2.20		0.95	0.18	
			P ₈	$\varnothing 49.60 \times 49.85$	2.68	2.64	0.93	2.14	2.19	0.96	0.22	0.28
			P ₉	$\varnothing 49.31 \times 50.11$	2.61		0.95	2.24		0.98	0.44	
	0.30	51.80	P ₁₀	$\varnothing 49.31 \times 50.40$	2.81		0.94	2.21		0.95	0.37	
			P ₁₁	$\varnothing 49.05 \times 49.87$	2.85	2.81	0.95	2.16	2.18	0.97	0.30	0.34
			P ₁₂	$\varnothing 49.42 \times 49.87$	2.78		0.94	2.18		0.96	0.35	
	0.50	58.70	P ₁₃	$\varnothing 49.40 \times 49.93$	2.89		0.95	2.82		0.97	0.54	
			P ₁₄	$\varnothing 49.62 \times 49.96$	2.81	2.81	0.99	2.73	2.73	0.96	0.49	0.50
			P ₁₅	$\varnothing 49.32 \times 49.79$	2.73		0.95	2.63		0.96	0.47	
45° oblique bedding	0	0	YX ₁		2.81		0.94	2.77		0.95		
			YX ₂		2.85	2.81	0.95	2.71	2.78	0.95		
			YX ₃		2.78		0.97	2.85		0.96		
	0.10	28.46	X ₁	$\varnothing 49.49 \times 50.03$	2.75		0.99	2.38		0.97	0.17	
			X ₂	$\varnothing 49.27 \times 49.63$	2.81	2.75	0.98	2.28	2.38	0.95	0.19	0.16
			X ₃	$\varnothing 49.31 \times 49.30$	2.68		0.97	2.47		0.96	0.12	
	0.15	32.59	X ₄	$\varnothing 49.24 \times 49.93$	2.67		0.99	2.39		0.98	0.29	
			X ₅	$\varnothing 49.27 \times 49.33$	2.75	2.65	0.95	2.31	2.31	0.96	0.21	0.24
			X ₆	$\varnothing 49.27 \times 49.82$	2.54		0.98	2.23		0.95	0.22	
	0.20	41.43	X ₇	$\varnothing 49.25 \times 49.90$	2.76		0.95	2.08		0.94	0.20	
			X ₈	$\varnothing 49.60 \times 49.38$	2.71	2.70	0.92	2.17	2.12	0.92	0.21	0.22
			X ₉	$\varnothing 49.29 \times 49.05$	2.64		0.93	2.12		0.93	0.25	
	0.30	51.80	X ₁₀	$\varnothing 49.40 \times 50.28$	2.47		0.98	2.01		0.93	0.21	
			X ₁₁	$\varnothing 49.38 \times 50.88$	2.61	2.55	0.96	2.07	2.06	0.92	0.17	0.18
			X ₁₂	$\varnothing 49.71 \times 50.02$	2.58		0.97	2.11		0.95	0.16	
	0.50	58.70	X ₁₃	$\varnothing 49.66 \times 50.44$	2.79		0.98	2.26		0.96	0.63	
			X ₁₄	$\varnothing 49.73 \times 49.91$	2.75	2.73	0.97	2.31	2.28	0.94	0.72	0.71
			X ₁₅	$\varnothing 49.46 \times 50.05$	2.64		0.96	2.28		0.93	0.78	

2.2 高压压汞实验

高压压汞实验是测量固体孔隙参数的常规方法, 孔径测量范围比较大, 可以测出从微孔到大孔的所有孔隙。结合 Washburn 方程, 利用 Menger 海绵分形理论^[31] 可以定量描述煤体孔隙的粗糙度和不规则程度, 从而探析煤体孔隙的吸附、解吸及渗流参数。将 Menger 模型作为压汞实验数据的分形模型, 结合压汞实验数据可以得出煤体的分形维数, 计算公式为

$$D = [\ln(dV_p/dp_H) - \ln\alpha]/\ln p_H + 4 \quad (5)$$

式中: p_H 为进汞压力, MPa; V_p 为压力 p_H 作用下的进汞量, cm^3 。以 $\ln(dV_p/dp_H)$ 和 $\ln p_H$ 的比值为斜率 K , 则分形维数 $D=K+4$ 。

2.3 低温液氮实验

低温液氮实验是将吸附于一定固体表面上的气体量记录为吸附物质的吸附量与相对压力的函数,采用等温线脱附分支上一系列逐步降低的相对压力,或等温线吸附分支上一系列逐步升高的相对压力(也可二者并用)进行计算,从而得到多孔物质材料微观孔隙参数的实验方法。低温液氮数据可以采用 FHH 模型得出不同冲击荷载、不同方向煤体的分形维数^[22]。

FHH 模型的分形维数计算基于以下公式

$$\ln(V/V_0) = n + A \ln[\ln(p_0/p)] \quad (6)$$

式中: V 为平衡压力 p 下吸附的气体体积, cm^3 ; V_0 为单分子层吸附的气体体积, cm^3 ; p 为平衡压力, MPa; p_0 为饱和蒸汽压, MPa; A 为对数曲线的斜率; n 为常数; 分形维数 $D = 3 + A$ 。

2.4 分形数据计算与分析

2.4.1 分形维数计算

根据压汞实验及低温液氮实验的测试数据,结合式(1)、式(2)可以得出不同方向、不同冲击荷载作用下的分形维数(分形维数大小见表 2)。通过计算发现:当孔径小于或等于 100 nm 时,基于压汞实验测试数据的分形维数不在 2~3 之间;而当孔径大于或等于 100 nm 时,基于液氮实验测试数据的分形维数也不在 2~3 之间。根据相关研究^[32],以上数据不具有分形意义。这可能与两种方法的测试原理有关,压汞法是根据汞的不浸润性进行孔隙参数测试,进入孔隙直径越小,所需要汞的压力越大,而较大的汞压力会破坏孔隙结构,因此,压汞法对孔径小于或等于 100 nm 的孔隙参数测量不准确。而低温液氮的测试原理是吸附与凝聚理论,根据孔吸附液氮的体积计算孔隙参数,该方法对孔径大于或等于 100 nm 的孔隙参数测量不准确^[33-34]。所以表 2 只统计了基于压汞实验数据、孔径大于 100 nm 孔隙的分形维数和基于液氮实验数据、孔径小于 100 nm 孔隙的分形维数(为了保证数据的有效统计意义,降低煤体离散性对结果的影响,表 2 中所有数据均取同等条件下 4 个煤样数据的平均值)。根据 Yao 等^[20,35]、宋晓夏等^[36]的研究结果,将孔径大于 100 nm 的孔隙称为渗流孔,孔径小于 100 nm 的孔隙称为吸附孔。

不同方向典型分形维数拟合曲线的对比如图 3~图 8 所示,相关系数均在 0.90 以上,拟合效果较好,数据可靠,符合分形规律。

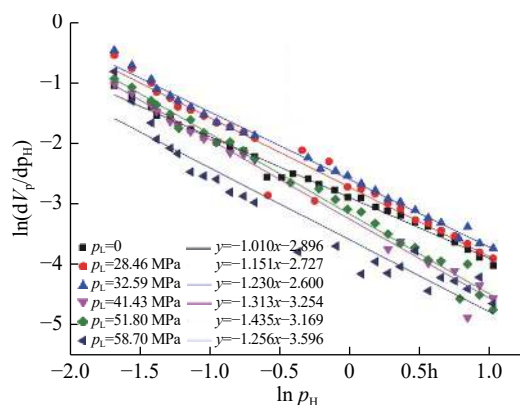


图 3 垂直层理方向渗流孔分形维数的对比

Fig. 3 Fractal dimension of the seepage hole in the vertical bedding direction

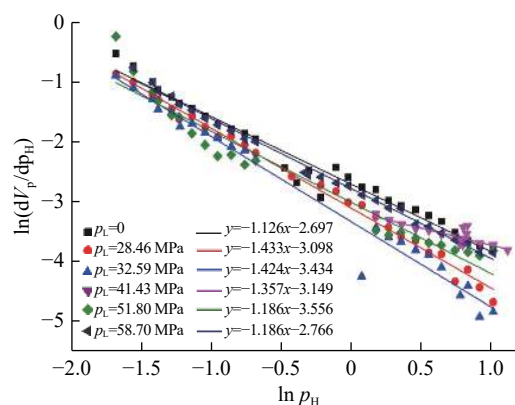


图 4 平行层理方向渗流孔分形维数的对比

Fig. 4 Fractal dimension of the seepage hole in the parallel bedding direction

从分形统计数据可知:垂直层理方向渗流孔的分形维数介于 2.51~2.98 之间,平均值为 2.75,最小值 2.51 对应的冲击荷载为 51.80 MPa,冲击前分形维数最大;平行层理方向渗流孔的分形维数介于 2.57~2.87 之间,平均值为 2.71,最小值对应的冲击荷载为 28.46 MPa,冲击前分形维数最大;斜交层理方向渗流孔的分形维数介于 2.55~2.81 之间,平均值为 2.70,最小值对应的冲击荷载为 51.80 MPa,冲击

前分形维数最大。这说明冲击前无烟煤煤样渗流孔的分形维数大, 孔隙结构复杂, 孔隙内部表面粗糙, 孔壁摩阻力大^[37], 不利于瓦斯的渗流与运移; 冲击后分形维数均小于冲击前, 说明冲击荷载改善了孔隙内部结构, 降低了孔隙表面粗糙度, 减小了孔壁摩阻力, 提高了瓦斯的渗流与运移速度。

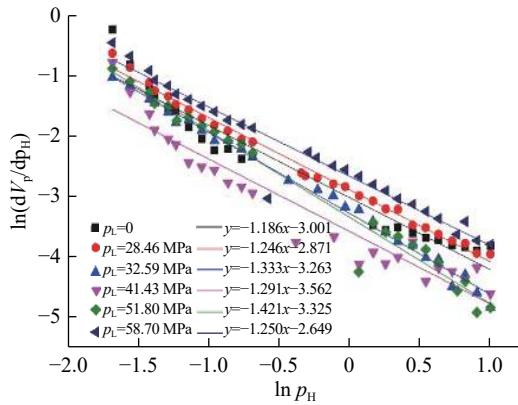


图 5 斜交层理方向渗流孔分形维数的对比

Fig. 5 Fractal dimension of the seepage hole in the oblique bedding direction

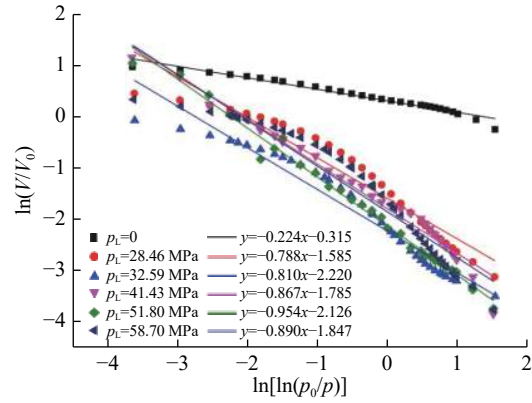


图 6 垂直层理方向吸附孔分形维数的对比

Fig. 6 Fractal dimension of the adsorption hole in the vertical bedding direction

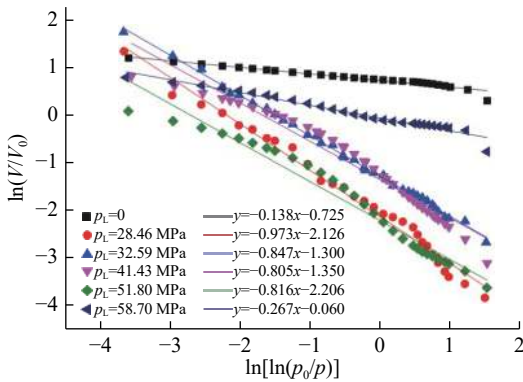


图 7 平行层理方向吸附孔分形维数的对比

Fig. 7 Fractal dimension of the adsorption hole in the parallel bedding direction

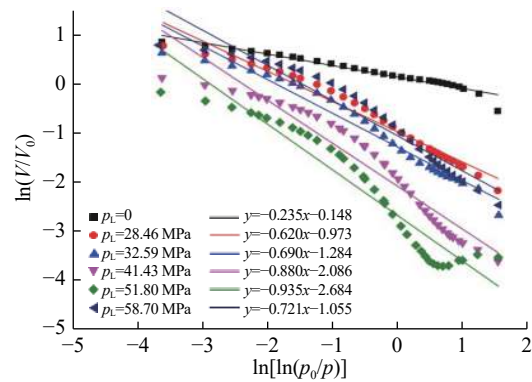


图 8 斜交层理方向吸附孔分形维数的对比

Fig. 8 Fractal dimension of the adsorption hole in the oblique bedding direction

吸附孔分形维数存在以下特点: 垂直层理方向吸附孔分形维数介于 2.05~2.78 之间, 平均值为 2.25, 最小值 2.05 对应的冲击荷载为 51.80 MPa, 冲击荷载作用前分形维数最大; 平行层理方向吸附孔分形维数介于 2.03~2.86 之间, 平均值为 2.36, 冲击荷载为 28.46 MPa 时分形维数最小, 冲击前分形维数最大; 斜交层理方向吸附孔分形维数介于 2.06~2.78 之间, 平均值为 2.32, 最小值 2.06 对应的冲击荷载为 51.80 MPa, 冲击前分形维数最大。这与渗流孔分形规律相似, 说明冲击后吸附孔的分形维数均小于冲击前, 冲击荷载减小了吸附孔的复杂程度、不规则程度及孔隙表面粗糙度, 大大降低了吸附孔的吸附能力, 冲击荷载能够将大量的瓦斯由吸附态转化为游离态, 从而促进瓦斯的有效解吸。

2.4.2 综合分析

定义分形维数减小率 δ 为

$$\delta = \frac{|D_1 - D_0|}{D_0} \times 100\% \quad (7)$$

式中: D_1 为冲击后分形维数, D_0 为冲击前分形维数。

分形维数减小率可以表征冲击荷载对孔隙的改造程度, 其值越大说明冲击荷载对该孔隙的改造程度越大, 改造效果越好。图 9 表征的是 3 个方向渗流孔和吸附孔分形维数减小率与冲击荷载的关系曲

线。从图9可以看出,对于渗流孔,在冲击后分形维数最小值相近的前提下(垂直、平行及斜交层理方向的分形维数的最小值分别为2.51、2.57和2.55),垂直和斜交层理方向的分形维数减小率随冲击荷载变化呈波动增加状态,平行层理方向的分形维数减小率随冲击荷载增加呈减小态势,吸附孔的分形维数减小率具有相同的变化规律。这说明冲击荷载改造煤体孔隙具有明显的冲击方向性,对于垂直和斜交层理方向煤体,需要较大冲击荷载才能达到较好的促解增渗效果,而对于平行层理方向煤体,较小冲击荷载就能达到很好的效果。因此,在实际抽采瓦斯过程中,应尽量沿平行层理方向布置炮孔,以达到消耗较少能量就能获得较好促解增渗的目的。

进一步对比吸附孔与渗流孔的分形维数减小率发现,同一方向、同一冲击荷载下吸附孔的分形维数减小率始终大于渗流孔的分形维数减小率(见图9),说明冲击荷载对吸附孔的改造程度较渗流孔大,即相对于冲击荷载提高瓦斯渗流与运移速度来说,冲击荷载能够更大程度地促进瓦斯的解吸,从而促进大量吸附瓦斯转化为游离瓦斯。这也解释了外载扰动过程中会产生超量煤层气^[38]、更容易发生瓦斯爆炸与瓦斯突出的原因。

图10为不同方向煤体分形维数与冲击荷载关系曲线。从图10可以看出,冲击后渗流孔与吸附孔的分形维数并不随着冲击荷载的增加持续减小,而是存在一个最小值,且不同方向的最小值所对应的冲击荷载不同,但两种孔隙同一方向分形维数最小值所对应的冲击荷载却完全一致,即垂直与斜交层理方向,渗流孔与吸附孔分形维数最小值对应的冲击荷载均为51.80 MPa,平行层理方向分形维数最小值对应的冲击荷载均为28.46 MPa。这说明无论是渗流孔还是吸附孔,同一方向的最佳冲击荷载是相同的,且对应的损伤值均介于0.10~0.20之间(见表2),根据刘运通等^[39]、唐红梅等^[40]的研究,该损伤值范围正好属于爆破裂隙区,即不管哪个冲击方向,爆破裂隙区是最佳的致裂增渗区。

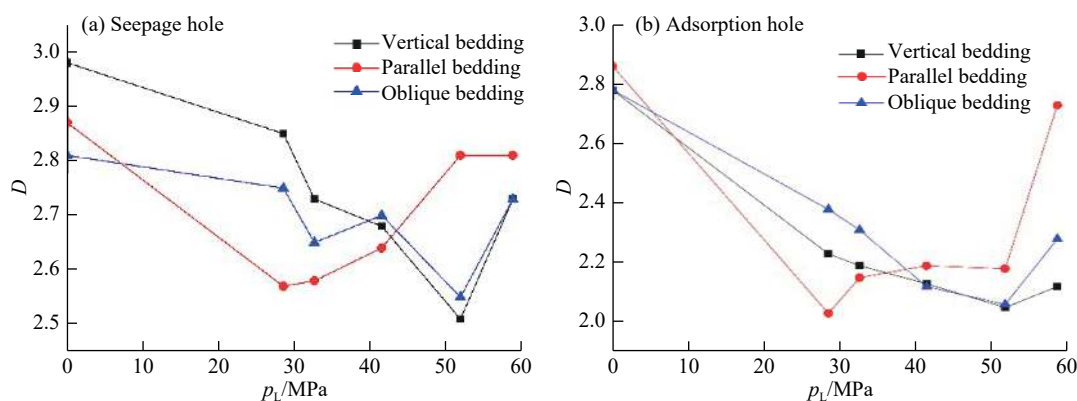


图10 不同方向煤体的分形维数与冲击荷载之间的关系

Fig. 10 Relationship between the fractal dimension and the impact load of coal bodies in different directions

3 结 论

采用压汞实验及低温液氮实验测试方法,研究了冲击荷载对无烟煤微观孔隙分形参数的影响规律,对比分析了冲击前后无烟煤的分形特征,得出以下主要结论。

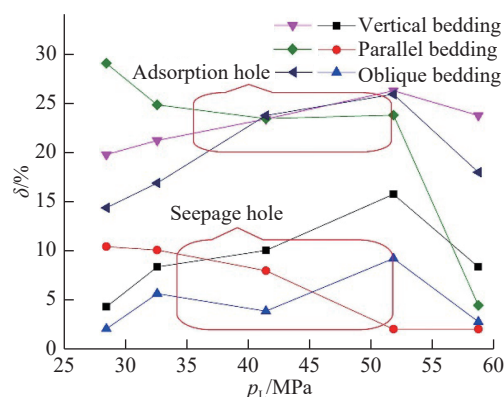


图9 不同方向煤体渗流孔与吸附孔分形维数减小率随冲击荷载的变化

Fig. 9 Fractal dimension reduction rates of the seepage hole and adsorption hole vary with the impact load

(1) 孔径小于或等于 100 nm 的压汞实验数据及孔径大于或等于 100 nm 的低温液氮实验数据不具有分形规律, 获得了孔径大于 100 nm(渗流孔)、基于压汞实验数据的孔隙分形特征和孔径小于 100 nm(吸附孔)、基于低温液氮实验数据的孔隙分形特征, 且冲击荷载作用后吸附孔的分形维数明显小于渗流孔, 说明冲击荷载改善吸附孔的能力较渗流孔强。

(2) 冲击荷载作用后的分形维数明显小于冲击前, 说明冲击荷载改善了孔隙内部结构, 降低了孔隙的复杂程度、不规则程度及表面粗糙度, 减小了孔壁摩擦阻力。对于渗流孔, 冲击荷载提高了瓦斯的渗流与运移速度; 对于吸附孔, 冲击荷载促进了瓦斯的解吸。

(3) 分形维数减小率能够反映冲击荷载对煤体孔隙的改造程度, 不管是渗流孔还是吸附孔, 垂直和斜交层理方向的分形维数变化率随冲击荷载变化呈波动增加状态, 平行层理方向的分形维数变化率随冲击荷载增加呈减小态势, 说明冲击荷载改造煤体孔隙具有明显的冲击方向性, 平行层理方向在能量消耗较小的前提下就能达到较好的促解增渗效果。

(4) 不同方向煤体的渗流孔和吸附孔所对应的最佳冲击荷载相同, 垂直和斜交层理方向煤体的最佳荷载均为 51.80 MPa, 平行层理方向煤体的最佳冲击荷载均为 28.46 MPa, 且对应的损伤值均属于爆破裂隙区。

参考文献:

- [1] 高为, 易同生, 金军, 等. 黔西地区煤样孔隙综合分形特征及对孔渗性的影响 [J]. 煤炭学报, 2017, 42(5): 1258–1265.
GAO W, YI T S, JIN J, et al. Pore integrated fractal characteristics of coal sample in western Guizhou and its impact to porosity and permeability [J]. Journal of China Coal Society, 2017, 42(5): 1258–1265.
- [2] 秦勇, 邱爱慈, 张永民. 高聚能重复强脉冲波煤储层增渗新技术试验与探索 [J]. 煤炭科学技术, 2014, 42(6): 1–7.
QIN Y, QIU A C, ZHANG Y M. Experiment and discovery on permeability improved technology of coal reservoir based on repeated strong pulse waves of high energy accumulation [J]. Coal Science and Technology, 2014, 42(6): 1–7.
- [3] WEI G Y, SHAN Z Y, ZHANG Z M. Research on hydraulic slotting technology controlling coal-gas outbursts [J]. Journal of Coal Science and Engineering, 2008, 14(1): 67–72.
- [4] 姜永东, 李业, 崔悦震, 等. 声场作用下煤储层渗透性试验研究 [J]. 煤炭学报, 2017, 42(S1): 154–159.
JIANG Y D, LI Y, CUI Y Z, et al. Experimental study on characteristics of coal reservoir permeability under acoustic wave [J]. Journal of China Coal Society, 2017, 42(S1): 154–159.
- [5] 赵丽娟, 秦勇. 超声波作用对改善煤储层渗透性的试验分析 [J]. 天然气地球科学, 2014, 25(5): 747–752.
ZHAO L J, QIN Y. Experiment on improving the permeability of coal reservoir under ultrasound [J]. Natural Gas Geoscience, 2014, 25(5): 747–752.
- [6] FORRESTAL M J, FREW D J, HANCHAK S J, et al. Penetration of grout and concrete targets with ogive-nose steel projectiles [J]. International Journal of Impacting Engineering, 1996, 18(5): 465–476.
- [7] 穆朝民, 王海露, 黄文尧, 等. 高瓦斯低透气性煤体定向聚能爆破增透机制 [J]. 岩土力学, 2013, 34(9): 2496–2500.
MU C M, WANG H L, HUANG W Y, et al. Increasing permeability mechanism using directional cumulative blasting in coal seams with high concentration of gas and low permeability [J]. Rock and Soil Mechanics, 2013, 34(9): 2496–2500.
- [8] 李恒乐, 秦勇, 张永民, 等. 重复脉冲强冲击波对肥煤结构影响的实验研究 [J]. 煤炭学报, 2015, 40(4): 915–921.
LI H L, QIN Y, ZHANG Y M, et al. Experimental study on the effect of strong repetitive pulse shockwave on the pore structure of fat coal [J]. Journal of China Coal Society, 2015, 40(4): 915–921.
- [9] CAI Y D, LIU D M, PAN Z J, et al. Pore structure and its impact on CH₄ adsorption capacity and flow capability of bituminous and subbituminous coals from Northeast China [J]. Fuel, 2013, 103: 258–268.
- [10] MANDELBROT B B. The fractal geometry of nature [M]. San Francisco: Freeman, 1982: 35.
- [11] BIRD N, DÍAZ M C, SAA A, et al. Fractal and multifractal analysis of pore-scale images of soil [J]. Journal of Hydrology, 2006, 322(1/2/3/4): 211–219.
- [12] DATHE A, EINS S, NIEMEYER J, et al. The surface fractal dimension of the soil-pore interface as measured by image analysis [J]. Geoderma, 2001, 103(1/2): 203–229.
- [13] HUANG S J, YU Y C, LEE T Y, et al. Correlations and characterization of porous solids by fractal dimension and porosity [J].

- Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 1999, 274(3/4): 419–432.
- [14] HILDGEN P, NEKKA F, HILDGEN F, et al. Macroporosity measurement by fractal analysis [J]. Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications, 1997, 234(3/4): 593–603.
- [15] YANG F, NING Z F, LIU H Q. Fractal characteristics of shales from a shale gas reservoir in the Sichuan Basin, China [J]. *Fuel*, 2014, 115: 378–384.
- [16] LIU X J, XIONG J, LIANG L X. Investigation of pore structure and fractal characteristics of organic-rich Yanchang formation shale in central China by nitrogen adsorption/desorption analysis [J]. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2015, 22(1): 62–72.
- [17] 朱汉卿, 贾爱林, 位云生, 等. 蜀南地区五峰-龙马溪组页岩微观孔隙结构及分形特征 [J]. *科学技术与工程*, 2018, 18(10): 12–19.
- ZHU H Q, JIA A L, WEI Y S, et al. Microscopic pore structure and fractal characteristics of Wufeng-Longmaxi shale, south Sichuan [J]. *Science Technology and Engineering*, 2018, 18(10): 12–19.
- [18] GARBACZ J K. Fractal description of partially mobile single gas adsorption on energetically homogeneous solid adsorbent [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 1998, 143(1): 95–101.
- [19] LEE G J, PYUN S I, RHEE C K. Characterization of geometric and structural properties of pore surfaces of reactivated microporous carbons based upon image analysis and gas adsorption [J]. *Microporous and Mesoporous Materials*, 2006, 93(1/2/3): 217–225.
- [20] YAO Y B, LIU D M, TANG D Z, et al. Fractal characterization of adsorption-pores of coals from North China: an investigation on CH₄ adsorption capacity of coals [J]. *International Journal of Coal Geology*, 2008, 73(1): 27–42.
- [21] XU L J, ZHANG D J, XIAN X F. Fractal dimensions of coals and cokes [J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1997, 190(2): 357–359.
- [22] 宋昱, 姜波, 李凤丽, 等. 低-中煤级构造煤纳米孔分形模型适用性及分形特征 [J]. *地球科学*, 2018, 43(5): 1611–1622.
- SONG Y, JIANG B, LI F L, et al. Applicability of fractal models and nanopores' fractal characteristics for low-middle rank tectonic deformed coals [J]. *Earth Science*, 2018, 43(5): 1611–1622.
- [23] 王登科, 刘淑敏, 魏建平, 等. 冲击载荷作用下煤的破坏特性试验研究 [J]. *采矿与安全工程学报*, 2017, 34(3): 594–600.
- WANG D K, LIU S M, WEI J P, et al. The failure characteristics of coal under impact load in laboratory [J]. *Journal of Mining & Safety Engineering*, 2017, 34(3): 594–600.
- [24] 刘晓辉, 张茹, 刘建锋. 不同应变率下煤岩冲击动力试验研究 [J]. *煤炭学报*, 2012, 37(9): 1528–1534.
- LIU X H, ZHANG R, LIU J F. Dynamic test study of coal rock under different strain rates [J]. *Journal of China Coal Society*, 2012, 37(9): 1528–1534.
- [25] XODOT B B. 煤与瓦斯突出 [M]. 宋世钊, 王佑安, 译. 北京: 中国工业出版社, 1966: 310–318.
- [26] YUAN J, TAKEDA N, WAAS A M. A note on data processing in the split Hopkinson pressure bar tests [J]. *Experimental Techniques*, 1998, 22(5): 21–24.
- [27] SHAN R L, JIANG Y S, LI B Q. Obtaining dynamic complete stress-strain curves for rock using the split Hopkinson pressure bar technique [J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2000, 37(6): 983–992.
- [28] 陈俊宇, 裴向军, 杜瑞锋, 等. 冲击载荷作用下砂岩的动力学特性及能耗规律 [J]. *科学技术与工程*, 2019, 19(31): 304–310.
- CHEN J Y, PEI X J, DU R F, et al. Dynamic characteristics and energy consumption of sandstone under impact loading [J]. *Science Technology and Engineering*, 2019, 19(31): 304–310.
- [29] KOLSKY H. An investigation of the mechanical properties of materials at very high rates of loading [J]. *Proceedings of the Physical Society (Section B)*, 1949, 62: 676–700.
- [30] LUNDBERG B. A split Hopkinson bar study of energy absorption in dynamic rock fragmentation [J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Science & Geomechanics Abstracts*, 1976, 13(6): 187–197.
- [31] 赵迪斐, 郭英海, WANG G, 等. 基于分形建模的高煤级煤孔隙结构特征量化表征-以阳泉矿区山西组煤样为例 [J]. *东北石油大学学报*, 2019, 43(3): 53–67.
- ZHAO D F, GUO Y H, WANG G, et al. Quantitative characterization of pore structure characteristics of high quality coal based on fractal modeling: taking coal samples from Shanxi Formation in Yangquan Mining Area as an example [J]. *Journal of Northeast Petroleum University*, 2019, 43(3): 53–67.
- [32] RIGBY S P. Predicting surface diffusivities of molecules from equilibrium adsorption isotherms [J]. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 2005, 262(1/2/3): 139–149.
- [33] 杨峰, 宁正福, 张世栋, 等. 基于氮气吸附实验的页岩孔隙结构表征 [J]. *天然气工业*, 2013, 33(4): 135–140.

- YANG F, NING Z F, ZHANG S D, et al. Characterization of pore structures in shales through nitrogen adsorption experiment [J]. *Natural Gas Industry*, 2013, 33(4): 135–140.
- [34] 吉小峰. 煤中纳米孔隙发育特征及其对气体运移的控制机理研究 [D]. 焦作: 河南理工大学, 2018.
- JI X F. Development characteristics of nanopores in coal and its controlling mechanism on gas migration [D]. Jiaozuo: Henan Polytechnic University, 2018.
- [35] YAO Y B, LIU D M, TANG D Z, et al. Fractal characterization of seepage-pores of coals from China: an investigation on permeability of coals [J]. *Computers & Geosciences*, 2009, 35(6): 1159–1166.
- [36] 宋晓夏, 唐跃刚, 李伟, 等. 中梁山南矿构造煤吸附孔分形特征 [J]. *煤炭学报*, 2013, 38(1): 134–139.
- SONG X X, TANG Y G, LI W, et al. Fractal characteristics of adsorption pores of tectonic coal from Zhongliangshan southern coalmine [J]. *Journal of China Coal Society*, 2013, 38(1): 134–139.
- [37] 林海飞, 刘静波, 严敏, 等. CO_2/CH_4 在煤储层中扩散规律的分子动力学模型 [J]. *中国安全生产科学技术*, 2017, 13(1): 84–89.
- LIN H F, LIU J B, YAN M, et al. Molecular dynamics simulation on diffusion rules of CO_2/CH_4 in coal reservoir [J]. *Journal of Safety Science and Technology*, 2017, 13(1): 84–89.
- [38] 董怡静, 韩雨桢, 候泉林, 等. 煤变形产气的力化学机理探讨 [J]. *煤炭学报*, 2017, 42(4): 942–949.
- DONG Y J, HAN Y Z, HOU Q L, et al. Mechanochemistry mechanism of gas generation during coal deformation [J]. *Journal of China Coal Society*, 2017, 42(4): 942–949.
- [39] 刘运通, 高文学. 爆炸荷载下岩石损伤的数值模拟研究 [J]. *岩石力学与工程学报*, 2001, 20(6): 789–792.
- LIU Y T, GAO W X. Numerical simulation on rock damage under explosion loading [J]. *Chinese Journal of Rock Mechanics and Engineering*, 2001, 20(6): 789–792.
- [40] 唐红梅, 周云涛, 廖云平. 地下工程施工爆破围岩损伤分区研究 [J]. *振动与冲击*, 2015, 34(23): 202–206.
- TANG H M, ZHOU Y T, LIAO Y P. Damage zone of surrounding rock of underground engineering under construction blasting [J]. *Journal of Vibration and Shock*, 2015, 34(23): 202–206.

Fractal Study on Influence of Impact Load on Microscopic Pore of Anthracite

WANG Yixian^{1,2}, LIANG Weimin¹

(1. School of Civil Engineering, Henan Polytechnic University, Jiaozuo 454000, Henan, China;

2. Henan Technical College of Construction, Zhengzhou 450064, Henan, China)

Abstract: In order to reveal the influence of impact loading on the microscopic pore structure of anthracite, the shock and stress waves of the impact stress in different attenuation processes were simulated by using the split Hopkinson pressure bar (SHPB) impact loading system, and the fractal characteristics of the pore structures of anthracite in different directions of Zhaogu No.2 Mine (vertical, parallel and 45° oblique to the bedding direction) were studied by using the fractal theory based on the test data of mercury intrusion and low-temperature liquid nitrogen before and after impacting. The results show that for the seepage hole, the impact loading increases the gas seepage and migration velocity. For the adsorption hole, the impact loading reduces the adsorption capacity of the adsorption hole, which promotes the desorption of gas. Fractal dimension has obvious impact directionality, and the fractal dimension of the adsorption hole is obviously smaller than that of the seepage hole; the optimal impact loadings of anthracite in different directions are different. The optimal loading in the vertical bedding direction and the oblique bedding direction is 51.80 MPa, and the optimal impact loading in the parallel bedding direction is 28.46 MPa. The research results can provide support for the discussion of the mechanism of impact loading to promote gas drainage.

Keywords: impact loading; anthracite; fractal theory; microscopic pore; the mercury injection; low temperature liquid nitrogen