高 压 物 理 学 报

GAOYA WULI XUEBAO

1987 年 9 月创刊

2019 年主题专刊

·高压下材料动态响应的计算与模拟·

目　　次

微喷射现象数值模拟研究进展概述 …… 邵建立,何安民,王　裴

〈100〉LiF 高速冲击变形过程的晶体塑性有限元模拟 …… 刘静楠,叶常青,陈开果,俞宇颖,沈　耀

金属材料失效分析的新方法…… 周　琳,文鹤鸣

铜粉末动态压缩行为的多颗粒有限元分析 …… 彭克锋,潘　昊,赵　凯,郑志军,虞吉林

金属内冲击波跨晶界传播的应力分配机制初探 …… 王　轩,黄生洪,张永亮

弹体材料在超高速碰撞过程中的物相演化…… 李依潇,王生捷

聚脲涂覆钢板在爆炸载荷作用下的动态响应 …… 王殿玺,郭香华,张庆明

基于 Lagrangian 分析法的梯度泡沫金属动态力学行为研究 …… 荣　誉,刘志芳,李世强,王志华

冲击载荷下分层梯度泡沫材料中的应力波传播特性 …… 赵　转,李世强,刘志芳

面内冲击荷载下半凹角蜂窝的抗冲击特性 …… 陈　鹏,侯秀慧,张　凯

《高压物理学报》2019 年主题专刊名录 ……《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》2019 年主题专刊名录

- 高压物性实验研究
- 高压物性的计算与模拟
- 高压合成新材料
- 高压地球科学
- 高压实验技术
- 高压下材料动态响应的计算与模拟
- 高压下材料动态响应实验研究
- 脆性材料的动态响应
- 界面不稳定性
- 高压科学应用——炸药起爆及安全性
- 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

DOI: 10.11858/gywlxb.20190786

微喷射现象数值模拟研究进展概述

邵建立[1], 何安民[2], 王 裴[2]

(1. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;
2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘要: 对微喷射现象的国内外数值模拟研究进行了简要梳理与总结。首先, 对微喷射现象特征及其物理内涵进行了解读, 然后分别从分子动力学和连续介质力学层次, 概述了微射流和微层裂两种主要物质喷射机制的数值模拟研究进展, 最后归纳了微喷射现象数值模拟研究仍存在的一些难点问题。希望能为微喷射及相关领域的数值模拟与建模研究提供有益参考。

关键词: 微喷射; 冲击; 分子动力学; 连续介质力学

中图分类号: O521.2 **文献标识码:** A

本文所述的微喷射是指冲击波从金属等材料表面反射时产生的物质喷射。据报道, 这一现象最早由 Walsh 等[1] 在实验中发现。一般情况下, 喷射物的质量很小, 主要来源于(近)表面微米及亚微米尺度缺陷[2–4], 因此这种物质喷射常被简称为微喷射。由于其在冲击压缩科学与技术领域中的重要性[5–6], 微喷射现象自被发现以来便受到国内外研究学者的广泛关注与重视。早期的微喷射研究以实验手段为主[7–28], 多年来微喷射实验技术已取得长足进展, 发展了 Asay 膜[2, 14]、压电探针[15–16]、X 射线成像[17–18]、全息成像[19–20]、高速摄影[21]、质子照相[22–23]、光子多普勒测速[24–25] 以及回收[26–28] 等诸多测试技术。大量实验研究[9, 11] 表明, 微喷射是一种典型的多机制、多影响因素的复杂动力学现象, 图 1 和图 2 分别给出了喷射物形成机制示意图与实验观测结果。需要说明, 金属表面喷射物质量一般在每平方厘米 100 mg 以内, 喷射颗粒直径大多在 10 μm 以内, 而最大喷射速度可达每秒数公里, 这些现象特征为微喷射的精细测量带来极大困难。如何获得更直接、更精确的喷射数据仍然是当前实验研究领域的热点问题。

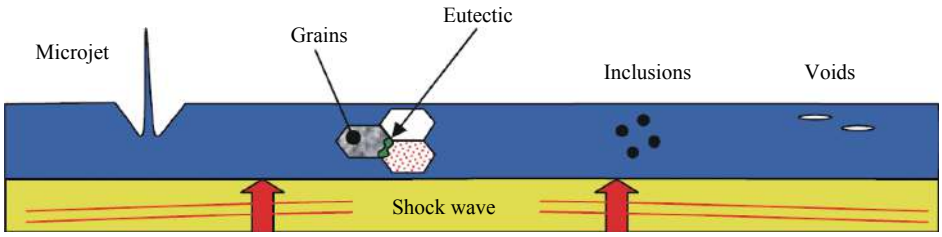


图 1 冲击波作用下可能的喷射物形成机制[9]

Fig. 1 Illustration of possible ejecta formation mechanisms[9]

喷射物的产生不仅与表面缺陷相关, 还显著地依赖于冲击压力、波形、材料强度与熔化等因素。随着冲击压力的升高, 微喷射物理机制会发生转变, 微喷射质量相应出现阶段性变化, 如图 3 所示。实

* **收稿日期:** 2019-05-28; **修回日期:** 2019-05-30

基金项目: 国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院“NSAF”联合基金(U1530216); 科学挑战专题(TZ2016001); 北京理工大学青年教师学术启动计划

作者简介: 邵建立(1979—), 男, 博士, 特别研究员, 主要从事材料动态力学响应理论研究.
E-mail: shao_jianli@bit.edu.cn

通信作者: 王 裴(1975—), 男, 博士, 研究员, 主要从事材料动态力学响应、多介质混合理论研究.
E-mail: wangpei@iapcm.ac.cn

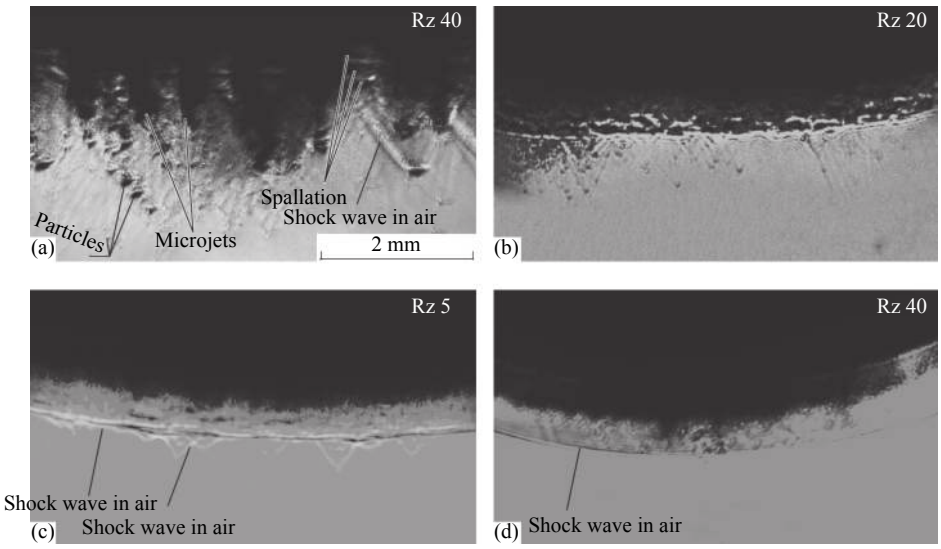


图 2　铅(a、b、c)和钢(d)表面喷射物照片[10]

Fig. 2　Photographs of the ejection of particles from the free surfaces of lead (a, b, c) and steel (d)[10]

际中，微射流和微层裂是最主要的两种物质喷射机制。前者主要与表面缺陷相关，因聚能效应产生较高速度喷射物；后者是指材料近表面的动态拉伸破坏，主要取决于加载波形以及材料是否熔化。对于爆轰或激光等加载方式，冲击波一般为非持续的，此时微射流与微层裂都会发生。总的来说，微喷射过程涵盖了近表面区域的大变形、熔化与损伤断裂等一系列复杂物理问题。

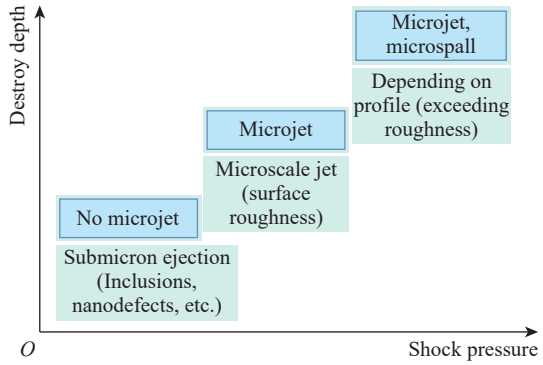


图 3　喷射物形成机制随冲击压力的变化

Fig. 3　Variation of the formation mechanism of ejecta with shock pressure

2017 年，Buttler 等[29]对微喷射现象的研究历史按年代作了简要回顾，指出微喷射物理是一个年轻的研究领域，但近年来已取得巨大进步，喷射物产生的物理机制至今已完全探明。最近，王裴等[30]总结了其课题组近年来在微喷射及喷射混合方面的理论研究进展。本文分别从微观分子动力学(Molecular Dynamics, MD)和宏观连续介质力学(Continuum Mechanics, CM)层次，回顾微喷射现象国内外数值模拟研究进展及相关建模工作，归纳了当前微喷射数值模拟研究仍存在的一些难点问题。

1　微喷射 MD 模拟进展

MD 是基于材料微观结构建模的确定性模拟方法，分子或原子的运动服从牛顿定律。有关 MD 原理与方法已有大量参考资料，这里不再赘述。随着近年来计算机性能的飞速发展，MD 模拟已成为微喷射物理机制研究的一种主要技术手段。

1993 年，张景琳等[31]率先开展了微喷射现象的 MD 研究。受当时计算条件限制，该模拟采用二维计算模型和较简单的 Morse 两体势，给出了冲击压力和沟槽角度因素的定性分析，得到的喷射速度与自由面速度的比值在 1～3 之间。虽然未能给出喷射质量的变化规律，但已显示出 MD 方法的独特优势。2002 年，陈军等[32]结合类紧束缚杂化多体势模拟了金属铜的微喷射现象，基于模拟结果分析了沟槽表面的波系传播以及负压区和正压区的形成，由此解释了沟槽产生微射流的动力学过程。2005 年，陈其峰等[33]采用大规模 MD 模拟对喷射质量进行了统计分析，见图 4，其中 α 为喷射系数，$\alpha=N_{\mathrm{E}}/N_{\mathrm{g}}$，$N_{\mathrm{E}}$ 和 N_{g} 分别为喷射粒子数和沟槽缺失粒子数。结果显示，熔化温度之下纳米沟槽射流的最大喷射系数约等于 1，熔化温度之上喷射系数会大幅度增加。与此同时，美国 Los Alamos 实验室 Germann 等开展

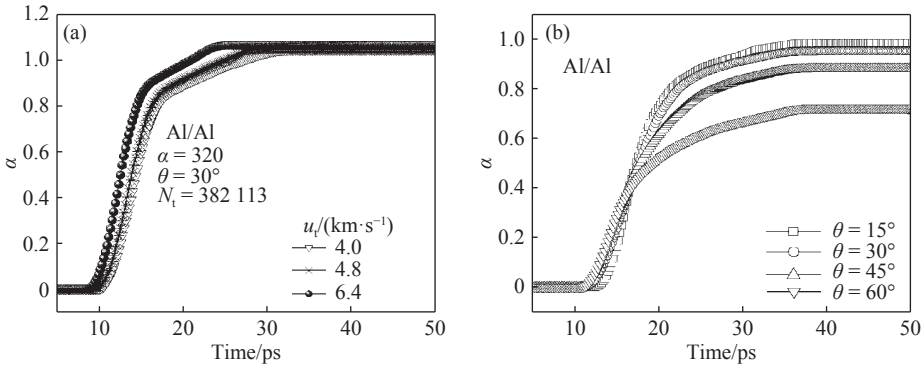


图 4　喷射系数(α)随时间的变化[33]

Fig. 4　Time evolution of the ejected mass coefficient (α)[33]

了更大规模的微喷射 MD 模拟，但至今未见详细报道，仅在文献 [34] 中展示了部分微射流形成及断裂的模拟图像。

如前文所说，微喷射质量并不总是对应缺陷质量。对此问题，邵建立等[35] 基于铝的势函数模型，模拟分析了不同冲击压力下的微射流形成过程，重点探讨了材料熔化的影响机制。模拟结果反映了缺陷塌缩局部熔化、卸载和冲击熔化等物理过程。例如，图 5 给出了典型卸载熔化(红色区域)时的射流喷射图像，图中颜色对应原子中心对称参数值。由此可解释熔化导致喷射质量显著增加的部分原因。此外，模拟结果还显示，最大喷射速度对材料是否熔化并不敏感，这与后来的实验结果[36] 是一致的。其原因在于，头部喷射物源于沟槽底部区域，这些物质从早期塌缩便处于熔化状态，卸载熔化则主要影响射流根部物质的流动。

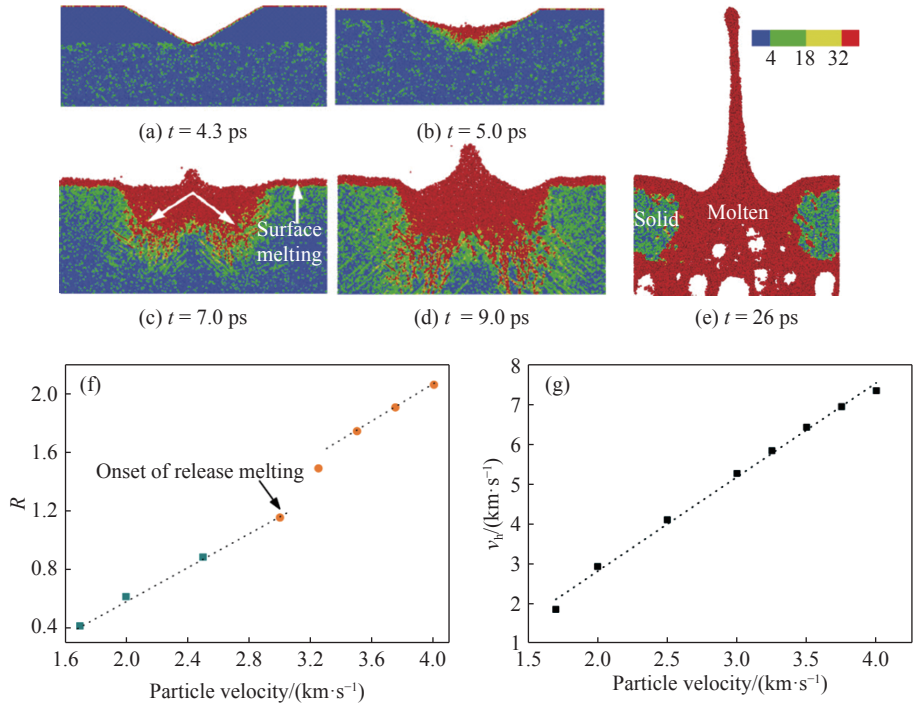


图 5　微射流喷射图像以及喷射系数(R)和头部速度(v_h)随粒子速度的变化[35]

Fig. 5　Microscopic views of microjet formation and variation of the microjetting factor (R) and the head velocity of the microjet (v_h) with the particle velocity[35]

除冲击压力以外，材料表面形貌是影响微射流发展的另一重要因素。叶建军等[37] 基于金属铜的 MD 模拟，定性比较了楔形、圆形和方形沟槽产生的射流，结果表明，楔形缺陷更容易发生微喷射，且喷射速度随着楔形角的增大而减小。2014 年，李博等[38] 对沟槽角度及缺陷形状进行了序列化 MD 模拟

分析。结果显示，最大喷射速度与自由面速度之比随着半角增加呈线性减小，且不同材料和不同尺度具有相似比值，但喷射系数则在某个中间角度达到最大值。图 6 为 2 km/s 碰撞速度下不同沟槽角度的喷射图像及其物质来源比较。此外，模拟结果还显示，晶体结构或缺陷形状的不对称性可引起射流方向的较大改变。

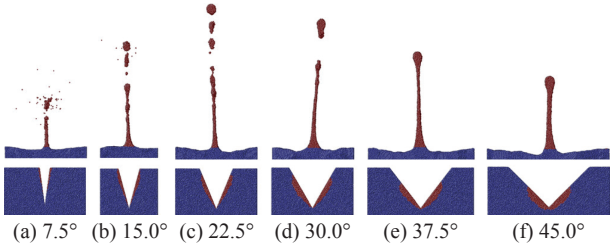


图 6　不同沟槽角度对应的微射流及其物质来源[38]

Fig. 6　Microjets and their sources for different half angles[38]

在速度梯度作用下，微射流最终将断裂成一定的颗粒分布状态。Durand 等[39] 基于金属铜的长时演化模拟研究了微射流断裂颗粒尺度分布，其结果显示喷射颗粒最终会保持球形，尺寸分布呈幂律关系，这与碎片化过程的大多数测量非常一致。之后，通过进一步对金属铜和锡不同表面扰动幅值下微射流破碎[40] 模拟发现，小尺寸极限服从幂律分布，而大尺寸极限服从指数分布。与此同时，何安民等[41–43] 开展了冲击强度与沟槽尺寸等因素的系列模拟分析，详细阐述了喷射颗粒存在的不同分布形式。结果表明，较小尺度颗粒服从包含不同特征常数的幂律分布，而较大尺度颗粒则更满足双指数分布。图 7 给出了金属铜微射流破碎过程的 MD模拟图像，颜色表示粒子速度[39, 43]。近期，吴凤超等[44] 模拟研究了气体环境下喷

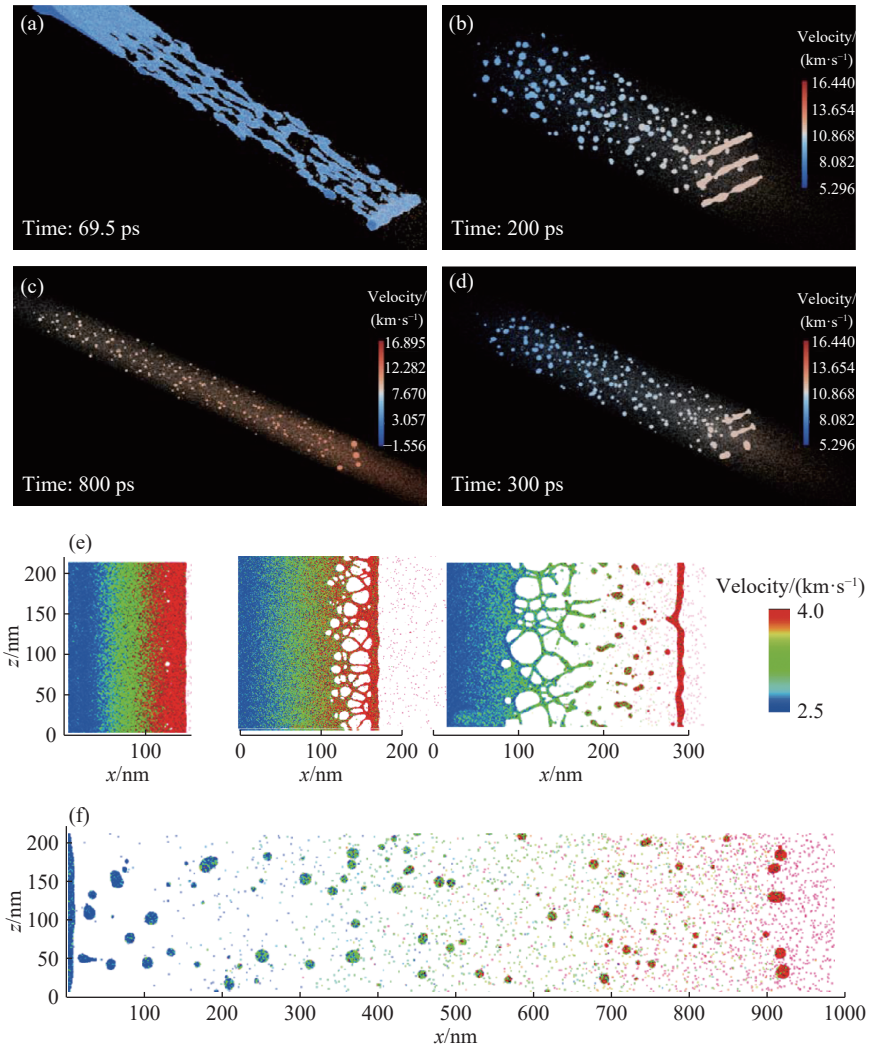


图 7　微射流破碎过程模拟图像[39, 43]

Fig. 7　Snapshots of microjet breakup process from MD simulations[39, 43]

射颗粒的形成和演化过程, 因涉及物质混合过程, 此处不再更多介绍。

当加载波为衰减冲击波时, 冲击前沿后的衰减波形不仅影响微射流机制, 还会诱发微层裂机制的发生。任国武等[45] 通过控制活塞推动时间模拟了衰减冲击波作用下金属铅的喷射性质。这种控制方法与薄飞片撞击靶板最终形成的衰减冲击波是等同的。模拟结果显示, 卸载或冲击熔化条件下喷射体的密度分布曲线因颗粒细小而变得光滑。值得关注的是, 小角度周期性表面对应的喷射系数较小(小于 0.6), 见图 8, 这与前文关于角度效应的模拟分析是一致的。与此同时, 邵建立等[46] 模拟了持续和衰减冲击加载下铝的喷射状态, 结果显示: 在较低的冲击压力下, 衰减冲击导致射流质量略有增加; 而在较高的冲击压力下, 衰减冲击导致微射流质量明显减少。

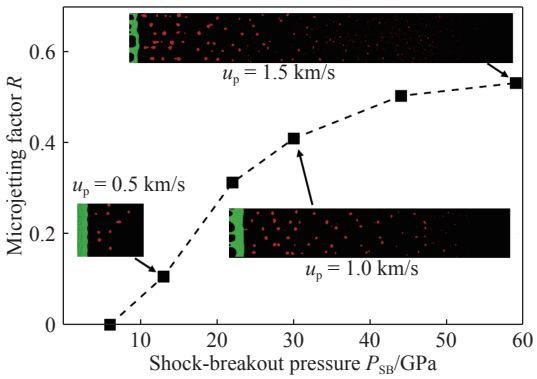


图 8　微射流喷射系数(R)随冲击压力(P_{SB})的变化[45]

Fig. 8　Variation of microjetting factor (R) with shock-breakout pressure(P_{SB})[45]

为进一步理解衰减波形对微射流的影响规律, 邵建立等[47] 通过活塞速度历史模拟了不同冲击波形加载情况。结果表明, 随着衰减速率的增加, 微射流质量呈现先增加后减小的趋势, 这一变化正是由于衰减冲击下微层裂的发生, 见图 9。图 9(b) 中左侧纵坐标ρ_z/ρ_0为当前密度与初始密度之比, 右侧纵坐标为粒子速度与 2 倍活塞速度之比。当衰减速度较低时, 主要表现为对界面的回拉及形状改变, 微射流因此被拉长; 而当衰减速率较高时, 缺陷区域获得的冲击波能量迅速减小, 微射流机制明显减弱。微射流和微层裂速度在空间上呈线性分布, 微射流具有更高的速度梯度。最近, 伍鲍等[48] 通过对低熔点金属锡在持续和非持续冲击下喷射状态模拟和对比分析, 进一步论述了加载波形因素的作用规律。

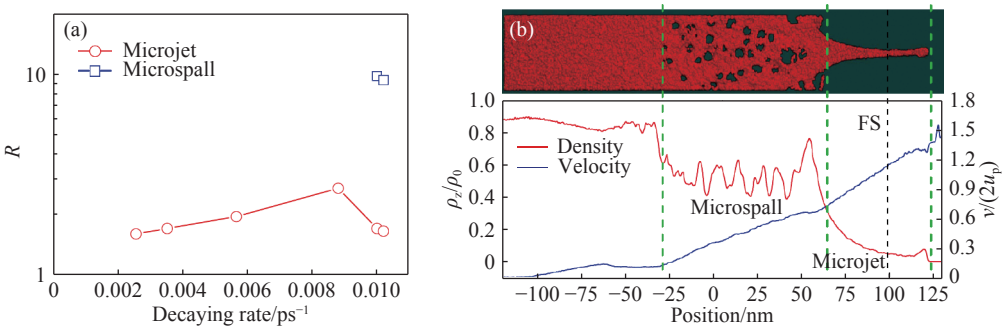


图 9　喷射系数 (R) 随衰减速率的变化和强衰减冲击下微射流与微层裂共存图像[47]

Fig. 9　Microjetting factor (R) and microscopic views of microjet and microspall under strong decaying shock[47]

显然, 伴随微层裂机制的出现, 微喷射状态已发生本质变化。2008 年, Soulard[49] 便模拟了表面无缺陷金属铜的微层裂过程。结果显示, 冲击熔化和卸载熔化两种状态均可得到连续的损伤演化至破碎过程, 且微层裂区的拉伸强度可以忽略; 但是当熔化速度足够慢时, 便可观察到表面固体层裂片的形成。后来, 向美珍等[50] 对金属铅的微层裂过程进行了 MD 模拟, 着重分析了经典层裂和微层裂空穴形核数量和空间分布的差异及应力演化差异, 并通过不同位置的热力学路径分析解读了表面和内部微层裂的差异, 见图 10。

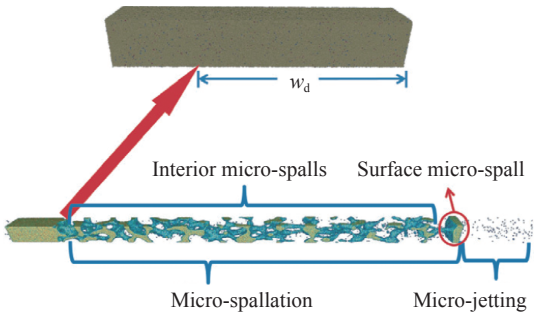


图 10　内部和表面微层裂图像及破坏物质对应的初始宽度(w_d)[50]

Fig. 10　Views of interior microspalls and surface microspall and the Lagrangian width of the damaged zone (w_d)[50]

此外，廖异等[51]进一步对低熔点金属锡的微层裂过程进行了模拟，给出了锡材料中孔洞成核及破坏过程的分析。邵建立等[52−53]基于不同碰撞速度下微层裂过程的模拟，分析了熔化前后的破坏形态差异（见图 11）及破坏深度的变化，并通过对冲击压力峰值和衰减波形的系列模拟，给出了一般三角形波作用下层裂片厚度和损伤深度的估算方法。

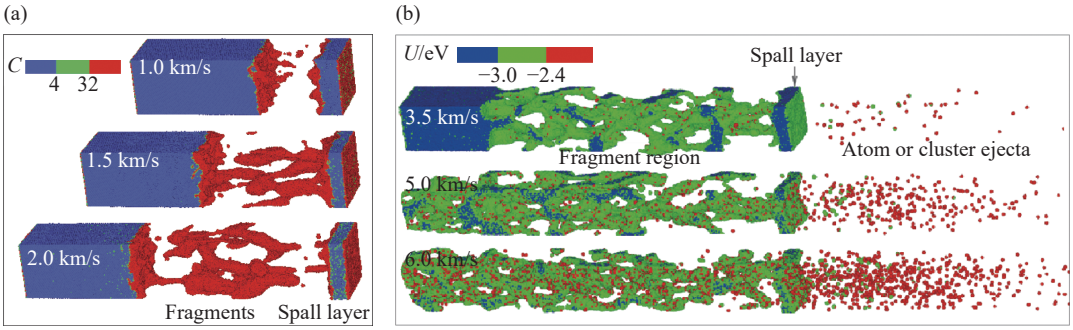


图 11　熔化前后损伤状态转变的微观图像[52]

Fig. 11　Microscopic views of damage before melting and after melting[52]

2　微喷射 CM 模拟进展

光滑粒子流体动力学（Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH）方法是一种无网格的拉氏计算方法，易于处理大变形问题；欧拉数值方法把网格固定在空间上，允许物质的大变形和流动。至今，微喷射现象的 CM 模拟研究主要采用这两类方法。2004 年，王裴等[54]采用 SPH 方法模拟了冲击加载下金属表面沟槽的射流现象，分析了喷射物的总质量、最大速度和质量-速度曲线，模拟结果与实验结果基本符合，表明 SPH 方法是模拟微射流的一种有效手段。图 12 为冲击加载（上）和具有一定加载波前沿宽度加载（下）的微射流形成过程。

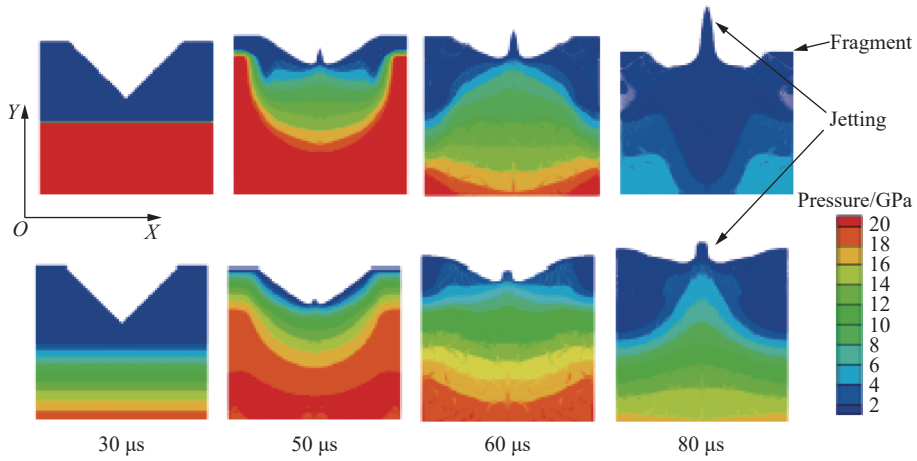


图 12　SPH 模拟的微射流形成过程[55]

Fig. 12　SPH simulation of microjet formation process[55]

随后，王裴等[56]基于 SPH 模拟结果分析了加载波前沿上升时间对微射流的影响规律。结果表明，随着加载波前沿宽度增加，微射流质量和头部速度都会减小，同时低速喷射物所占比例增大，这是由于沟槽斜面粒子的碰撞速度降低，碰撞角度增大，导致部分粒子达到射流强度封锁条件而不再形成射流，见图 13。通过金属铅和铜表面沟槽冲击微射流过程模拟[57]，进一步给出了头部速度和喷射系数随沟槽夹角的变化。结果显示，喷射系数在沟槽半角为 45°时达到最大值，随着角度的增加或减小，喷射系数均会减小；而最大喷射速度随沟槽角度的增加近似成线性减小，见图 14。此外，通过追踪粒子运动轨迹分析了微射流物质来源，发现随着沟槽夹角增加，射流物质来源由沟槽两侧逐步向沟槽底部过渡。

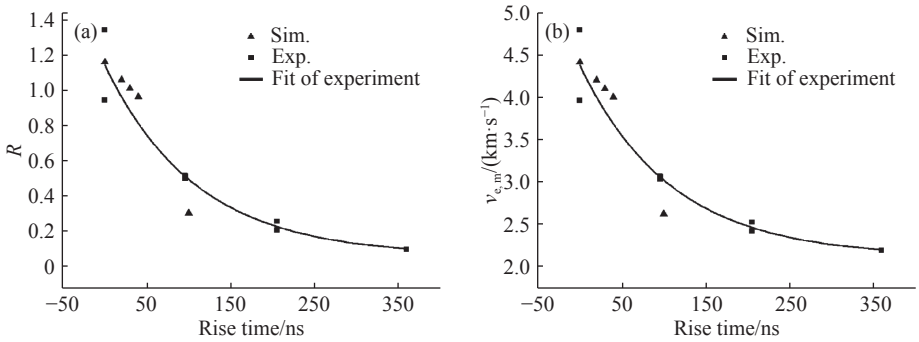


图 13　微射流喷射系数(R)和最大喷射速度($v_{e,m}$)随加载波前沿上升时间的变化[56]

Fig. 13　Variations of jetting factor(R) and the maximum jetting velocity ($v_{e,m}$) with the wave-front rise time[56]

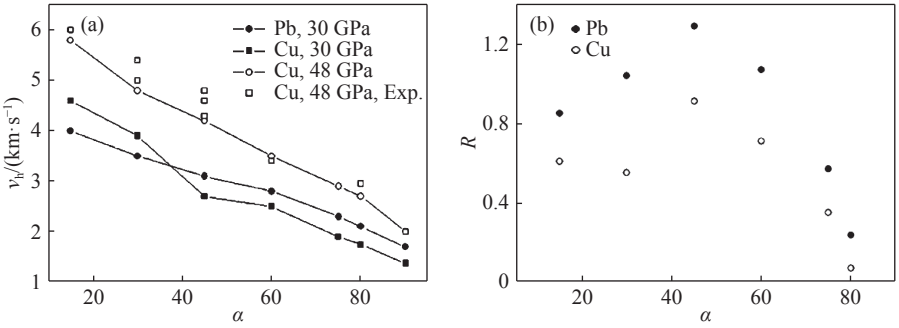


图 14　微射流头部速度(v_h)和喷射系数(R)随沟槽半角(α)的变化[57]

Fig. 14　Head velocity of microjet (v_h) and the jetting factor(R) change with the half angle of groove (α)[57]

此前, 大多数值模拟都采用了楔形槽等简化模型, 为细致考察表面形貌这一变化因素, 赵信文等[58]根据样品表面形貌的实测结果进行了 SPH 建模和模拟。结果表明, 基于实测样品缺陷建模的计算结果与实验结果更加符合, 见图 15。分析发现, 在实测样品缺陷诱导微喷射过程中存在“二次汇聚喷射”机制, 与单次喷射相比, 该机制可产生更高速度的喷射物, 并影响微喷物的空间密度分布。这再次表明表面微细结构对微喷射现象的影响是显著的。

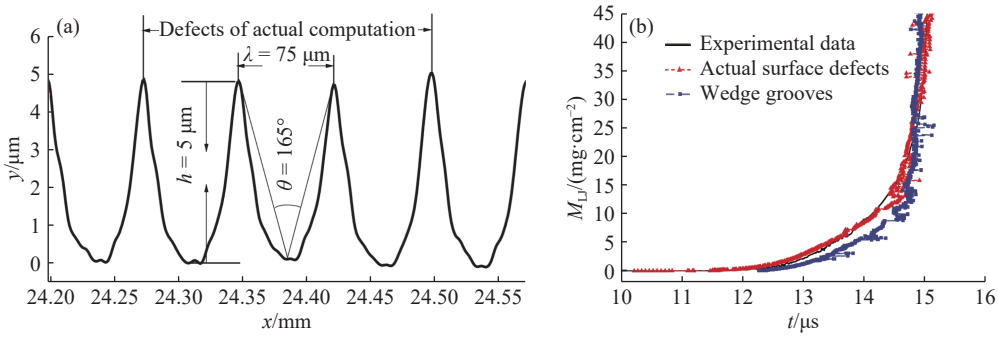


图 15　样品表面缺陷形貌(a)和微喷射累计质量(M_{LJ})(b)[58]

Fig. 15　The profile of the surface defect (a) and the cumulative mass (M_{LJ}) of ejection (b)[58]

上述 CM 模拟主要关注了持续冲击下微射流形成及质量累计过程。为从 CM 角度理解衰减冲击下近表面破坏模式与复杂喷射状态, 刘文斌等[59]采用 SPH 方法模拟了三角波加载下微喷射现象。根据模拟结果, 可将三角波加载下喷射物的空间分布分为高速颗粒、射流杆体、纵向散碎和复杂断裂等多个区域, 显然这与持续冲击下的尖钉-气泡结构有本质不同。统计结果显示, 在相同的冲击压力峰值下, 三角波加载产生的高速喷射物明显减少, 但会产生更多的低速喷射物, 因此总的喷射质量明显增加。

换句话说，此时衰减波形是决定喷射总量的主要因素，表面缺陷主要决定喷射物的分布状态，见图 16。此前，Rességuier 等[60] 曾利用 SPH 模拟结果解读了其激光加载微射流实验。

利用 Los Alamos 国家实验室开发的欧拉有限差分程序 PAGOSA，Kullback 等[61] 模拟研究了不同扰动幅值、波数和几何形状情况下的微射流过程。图 17 给出了几种典型喷射状态，该模拟中采用了 Mie-Grüniesen 状态方程和弹性理想塑性强度模型。结果表明，总的微喷射质量取决于初始扰动幅值和波数的乘积。微喷射质量随该乘积呈现阶段性变化，且当该乘积超过某阈值时，喷射质量便呈现出单调增加趋势。此外，刘超等[62−63] 采用二维弹塑性流体力学欧拉程序 MEPH，模拟分析了不同形状、不同角度沟槽缺陷的最大喷射速度及喷射系数的变化规律，并进一步讨论了不同缺陷形状对喷射速度和喷射系数的影响。相关结论与前文 SPH 模拟和实验基本吻合。

通过对 MD 和 CM（PAGOSA 程序）模拟结果的综合分析，见图 18（图中时间 τ 和位置 $k(Z\text{-}Z_u)$ 均以沟槽尺寸进行了缩比），Dimonte 等[64] 提出了一个简单的微喷射代数模型，该

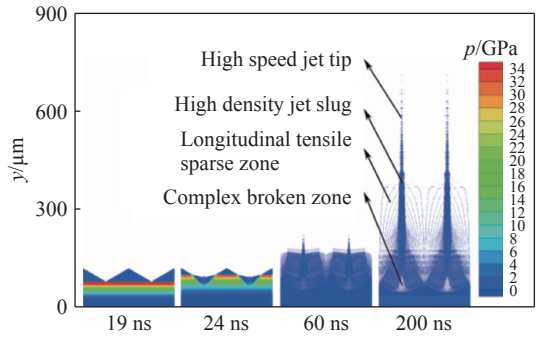


图 16　三角波加载下微喷射 SPH 模拟图像[60]

Fig. 16　SPH simulation of microjet views driven by decaying shock[60]

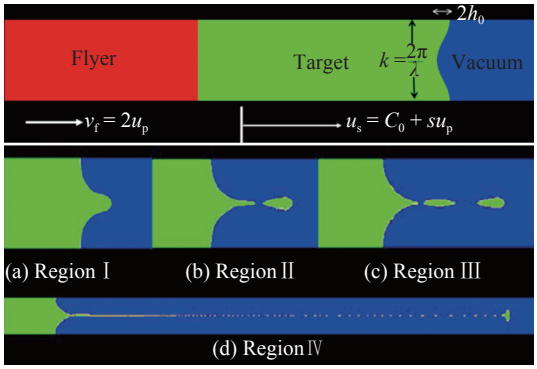


图 17　欧拉模拟得到的喷射状态的不同区域[61]

Fig. 17　Different regions of jetting state given by Euler simulation[61]

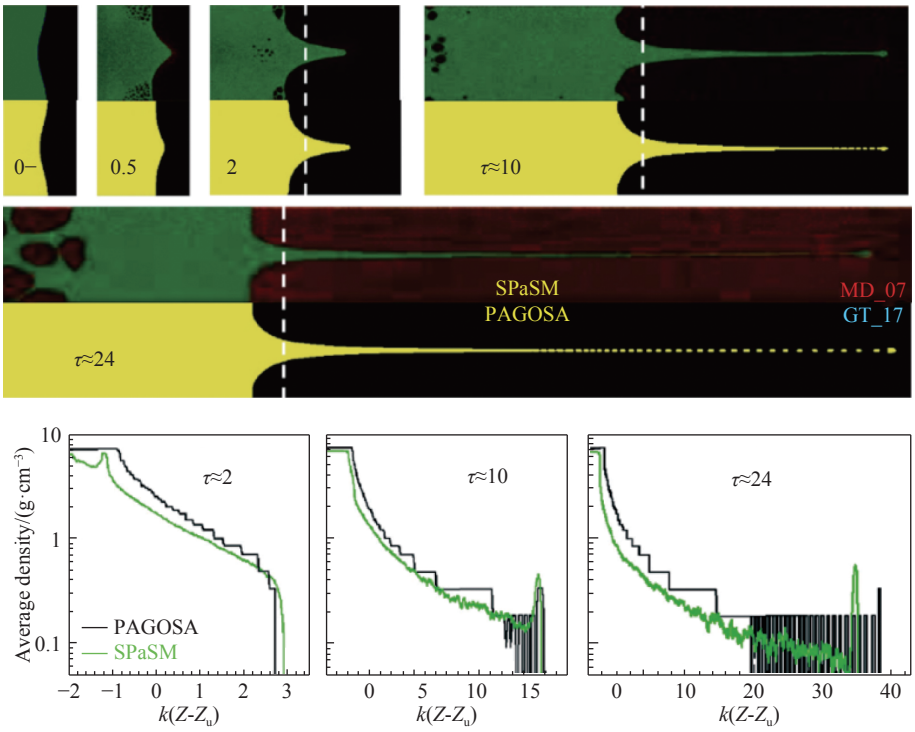


图 18　微射流 CM 和 MD 模拟结果比较[64]

Fig. 18　Comparison of CM and MD simulation results of microjet[64]

模型中微喷射面密度是由冲击后的金属密度和饱和的气泡幅值决定的, 该模型与 MD 和 CM 模拟结果一致, 并已被实验验证。Cherne 等[65] 同样基于 MD(SPaSM 程序)和 CM(FLASH 程序)模拟, 对多种材料的不同表面形貌进行了一系列数值分析。由此将上述喷射质量公式拓展至多种表面形状。

与此同时, 其他更多工作也采用了 MD 和 CM 模拟的联合分析[66–67]。其中, Dyachko 等[66] 对锡样品进行了 MD 和 SPH 对比模拟, 见图 19, 图中 v_{sp} 和 v_b 分别为尖钉和气泡的速度, ak 表示扰动幅值。SPH 模拟采用真实的实验尺寸, MD 则采用比例缩放的样品尺寸。结果表明, MD 和 SPH 模拟的射流速度和质量分布基本一致, 表面张力对小尺度样品喷射射流的深刻影响可以部分解释 MD 和实验中观察到的峰值速度差异。此外, Durand 等[67] 采用大规模 MD 和 CM 模拟开展了相近尺寸的数值模拟。CM 方法采用基于自适应网格细化的欧拉流体动力学方法, 其状态方程由 MD 模拟得到。模拟结果表明, CM 模拟得到的射流轮廓、质量和速度与 MD 方法所得结果一致, 见图 20, 并指出材料的黏性和表面张力对 CM 模拟结果有很大影响, 是 CM 建模中值得关注的问题。

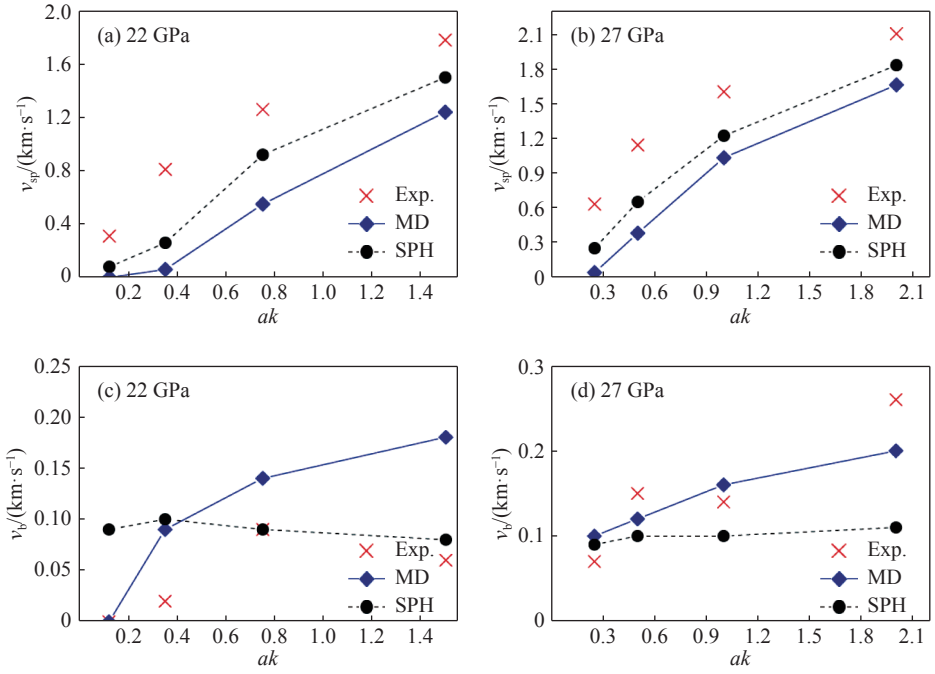


图 19　SPH 模拟与 MD 模拟及实验结果比较[66]

Fig. 19　Comparison of SPH simulation, MD simulation and experimental results[66]

3　基于数值模拟规律的建模进展

通过对微喷射现象的数值模拟研究, 希望建立包含材料性质、表面状态及动力学条件等因素的喷射物质总量、质量-速度及颗粒尺度分布模型, 以应用于工程力学问题的量化模拟中[6]。在早期研究中, Asay 等[4] 基于实验规律提出了一个由表面缺陷质量估算喷射总量的模型。韩长生[68] 从经典射流理论出发, 基于“等效金属罩质量”假设, 推导了定常流动下冲击波与楔形槽表面正规与非正规反射条件下微射流质量的半经验公式。这些模型可以大致描述部分实验结果,

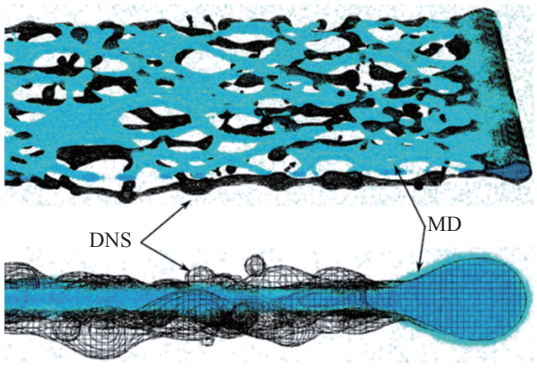


图 20　DNS 和 MD 模拟片状射流的比较[67]

Fig. 20　Comparison of the ejected sheets obtained with MD and DNS[67]

然而由于模型过于简化，无法描述更宽范围的实验数据及其变化规律，比如，喷射物总量与缺陷深度、沟槽角度或波长的关系，更为严重的是无法反映熔化前后材料喷射状态的显著差异。

随着数值模拟研究的不断深入，建模工作也取得可喜进展。2011 年，Georgievskaya 等[69] 基于不可压流体和小扰动假设，根据 Richtmyer-Meshkov（RM）不稳定性理论给出了喷射质量随时间演化的近似方程，并通过数值计算验证其估算的正确性。之后，Dimonte 等[64] 假设微射流总量由 RM 气泡饱和振幅决定，建立了与表面初始扰动相关的微射流总量模型。2015 年，Cherne 等[65]对上述模型进一步修正，引入抛物型气泡形状的假设，以及初始扰动相位反转的时间修正因子，最终构建了描述微射流总量以及最大速度随材料性质、表面扰动状态以及加载动力学条件变化的理论模型，并将其推广至不同形貌表面缺陷微射流喷射状态的描述。

$$m(t)=\frac{2}{3}m_0\ln\left[1+\frac{t-\Delta t}{\left(\beta+\dfrac{\Delta t}{\tau}\right)\tau}\right]\qquad t\geqslant\Delta t \tag{1}$$

$$\dot{\eta}^{\mathrm{s}}=\sqrt{3}\dot{\eta}_0^{\mathrm{s}},\quad \dot{\eta}_0^{\mathrm{b,s}}=F_{\mathrm{l}}F_{\mathrm{nl}}^{\mathrm{b,s}}|kh_0\Delta u| \tag{2}$$

式中：$m(t)$为t时刻的喷射面密度”，m_0为初始缺陷面密度，Δt为扰动反转特征时间，β为时间尺度因子，τ为约化时间，$\dot{\eta}^{\mathrm{s}}$为尖钉渐近增长速度，$\dot{\eta}_0^{\mathrm{b,s}}$为气泡或尖钉的线性增长阶段的最大速度，$F_{\mathrm{l}}$为线性冲击压缩因子，$F_{\mathrm{nl}}^{\mathrm{b,s}}$为非线性关联因子，$k$为初始扰动波数，$h_0$为初始扰动振幅，$\Delta u$为表面速度。该模型可以较好地描述熔化状态下金属微射流总量与最大速度的不同尺度（包括 MD 和 CM）数值模拟结果以及相关实验数据，是微喷射理论建模研究的重要进展。

根据强度介质不稳定性理论，未熔化材料仍可发生界面塑性流动失稳。在此情况下，虽然强度效应会抑制界面不稳定性的发展，但在特定状态下 RM 尖钉会持续增长，最终断裂破碎而形成物质喷射。为进一步发展强度介质微喷射模型，何安民等[70] 基于弹塑性欧拉数值模拟获得的强度介质扰动增长与物质喷射之间的内在联系，结合理想弹塑性固体界面 RM 不稳定理论，构建了强度介质微喷射总量模型，即

$$\sigma_{\mathrm{ej}}^{\max}=\frac{2}{3}\alpha\rho_0\left|\eta_{\mathrm{b}}^{\max}\right| \tag{3}$$

$$\eta_{\mathrm{b}}^{\max}=\eta_0-\frac{2}{3k}\ln\left[1+\frac{\rho_0}{2Y}|\dot{\eta}_0|^2\right] \tag{4}$$

式中：$\sigma_{\mathrm{ej}}^{\max}$为强度介质最大喷射质量，$\alpha$取为 0 ～1 之间小数，$\rho_0$为材料初始密度，$\eta_{\mathrm{b}}^{\max}$为气泡饱和振幅，$\eta_0$为初始扰动振幅，$k$ 为初始扰动波数，Y 为材料的等效屈服强度。

综合上述强度介质和纯流体微喷射模型，可以给出平面冲击下宽压力区间的喷射总量和最大速度的一般描述。然而对于更复杂的加载条件，则必须考虑实际波形等因素。对于爆轰、激光等加载波形条件，借助经验模型或判据条件，已进行部分数值模拟分析[71−73]。其中，张凤国等[74] 基于应力波传播理论，采用应力瞬时断裂判据和损伤累积判据，分析了简单三角波强加载下延性金属的多次层裂破坏问题，给出了层裂片厚度对冲击波宽度与强度的比值的变化，在强冲击加载条件下，破坏深度约为冲击波宽度的一半。最近，邵建立等[53] 基于 MD 模拟分析了不同衰减冲击波下金属铅的破坏形态和深度变化，结合模拟得到的样品内部拉应力和密度变化，给出了表面层裂片厚度和样品破坏深度的近似公式，即

$$T_{\mathrm{s}}=\frac{\lambda}{2}\frac{\rho_{\mathrm{s}}}{\rho_0}\frac{\sigma_{\mathrm{s}}}{\sigma_{\mathrm{b}}},\qquad D_{\mathrm{d}}=\frac{\lambda}{2}\frac{\rho_{\mathrm{d}}}{\rho_0}\left(1-\frac{\sigma_{\mathrm{s}}}{2\sigma_{\mathrm{b}}}\right) \tag{5}$$

式中：T_{s} 为层裂片厚度，λ为三角波宽度，ρ_{s}和ρ_{d}分别为层裂片和破坏区的平均密度，ρ_0为材料初始密度，σ_{s}和σ_{b}分别为层裂应力和冲击应力峰值。

关于喷射物颗粒尺度的信息，可以采用幂律关系和指数关系来描述其终态分布，但其中主要参数的取值还很难从理论上确定。实际上，MD 方法可以直接模拟出颗粒化全过程，但还局限于纳米尺度

和极端应变率条件，与实际情况下的断裂颗粒还相差很大。而从 CM 角度，采用射流失稳断裂[73]、能量破碎等理论[74] 可以对颗粒尺度进行估算，但这依然包含较多经验判据或参数，对实际状态下颗粒度的定量化分析仍然具有较高难度。

4　总结与展望

至今，微喷射现象研究已有 60 余年的历史，微喷射现象的主要特征及喷射物产生机制已被充分阐明，该领域研究正在蓬勃发展[29]。目前微喷射现象数值模拟主要包括微观尺度 MD 和宏观尺度 CM 两类方法，前者侧重于物理机理揭示，后者侧重于动力学分析。不同物理尺度模拟的对比分析受到越来越多的关注。根据研究现状，微喷射数值模拟仍存在以下几方面难点问题。

（1）微喷射现象的多物理尺度模拟。微喷射是典型的多尺度演化问题，现有模拟手段还局限于微观或宏观尺度，为发展更具物理基础的建模，需要特别关注不同物理尺度的耦合建模与模拟方法，从材料结构和动力学两方面深化对微喷射现象的量化规律认识。

（2）强冲击加卸载下表面区域的材料模型。实际上，表面物质与内部质点经历的力学途径存在明显差异，当我们重点关注表面物质演化时，需要考虑材料模型及参数的适用性，比如，Dimonte 等[75] 便利用不稳定性增长来反推材料表面区域的等效屈服强度。

（3）表面几何形貌和加载波形的复杂相互作用。冲击波与粗糙表面的相互作用实际上是一个三维或者准二维问题，在衰减冲击条件下可出现复杂的表面拉应力区，这会影响甚至改变近表面物质的破坏模式。这对于理解微喷射全局状态，尤其是低速喷射物的分布十分重要。

希望本文能为后续微喷射及相关领域的数值模拟与建模研究提供有益参考。

参考文献:

[1] WALSH J M, SHREFFLER R G, WILLIG F J. Limiting conditions for jet formation in high velocity collisions [J]. Journal of Applied Physics, 1953, 24(3): 349–359.

[2] ASAY J R, MIX L P, PERRY F C. Ejection of material from shocked surfaces [J]. Applied Physics Letters, 1976, 29(5): 284–287.

[3] ASAY J R. A model for estimating the effects of surface roughness on mass ejection from shocked materials: SAND78-1256 [R]. Albuquerque, NM, US: Sandia National Laboratories, 1978.

[4] ASAY J R. Material ejection from shock-loaded free surface of aluminum and lead: SAND76-0542 [R]. Albuquerque, NM, US: Sandia National Laboratories, 1976.

[5] 朱建士, 胡晓棉, 王裴, 等. 爆炸与冲击动力学若干问题研究进展 [J]. 力学进展, 2010, 40(4): 400–423.
ZHU J S, HU X M, WANG P, et al. A review on research progress in explosion mechanics and impact dynamics [J]. Advances in Mechanics, 2010, 40(4): 400–423.

[6] FUNG J, HARRISON A K, CHITANVIS S, et al. Ejecta source and transport modeling in the FLAG hydrocode [J]. Computers & Fluids, 2013, 83(16): 177–186.

[7] ANDRIOT P, CHAPRON P, OLIVE F. Ejection of material from shocked surfaces of tin, tantalum and lead-alloys [J]. AIP Conference Proceedings, 1982, 78: 505–509.

[8] 曾鉴荣, 庄以河. 动载荷下金属板表面的微物质喷射 [J]. 高压物理学报, 1987, 1(1): 88–92.
ZENG J R, ZHUANG Y H. Mass ejection from free surface of shock-loaded metallic plates [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1987, 1(1): 88–92.

[9] SORENSON D S, MINICH R W, ROMERO J L, et al. Ejecta particle size distributions for shock loaded Sn and Al metals [J]. Journal of Applied Physics, 2002, 92(10): 5830–5836.

[10] OGORODNIKOV V A, MIKHAILOV A L, BURTSEV V V, et al. Detecting the ejection of particles from the free surface of a shock-loaded sample [J]. Journal of Experimental and Theoretical Physics, 2009, 109(3): 530–535.

[11] ZELLNER M B, MCNEIL W V, HAMMERBERG J E, et al. Probing the underlying physics of ejecta production from shocked

Sn samples [J]. Journal of Applied Physics, 2008, 103(12): 123502.

[12] CHEN Y, HU H, TANG T, et al. Experimental study of ejecta from shock melted lead [J]. Journal of Applied Physics, 2012, 111(5): 053509.

[13] MONFARED S K, ORÓ D M, GROVER M, et al. Experimental observations on the links between surface perturbation parameters and shock-induced mass ejection [J]. Journal of Applied Physics, 2014, 116(6): 063504.

[14] 马云, 汪小松, 李欣竹, 等. ASAY 膜法测量微物质喷射总质量不确定度的初步实验研究 [J]. 高压物理学报, 2006, 20(2): 207–210.
MA Y, WANG X S, LI X Z, et al. Study of the uncertainty of the ejected Mass measured by ASAY foil method [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2006, 20(2): 207–210.

[15] VOGAN W S, ANDERSON W W, GROVER M, et al. Piezoelectric characterization of ejecta from shocked tin surfaces [J]. Journal of Applied Physics, 2005, 98(11): 113508.

[16] 文雪峰, 王健, 王晓燕, 等. 微喷射物质作用下脉冲信号电探针的放电机理 [J]. 爆炸与冲击, 2017, 37(5): 887–892.
WEN X F, WANG J, WANG X Y, et al. Discharging mechanism of pulse signal electric probe conducted by micro-jetting [J]. Explosion and Shock Waves, 2017, 37(5): 887–892.

[17] 叶雁, 李军, 朱鹏飞, 等. 脉冲 X 光照相在微物质喷射诊断中的应用 [J]. 高压物理学报, 2013, 27(3): 398–402.
YE Y, LI J, ZHU P F, et al. Flash X-ray radiography for diagnosing the ejecta from shocked metal surface [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2013, 27(3): 398–402.

[18] 张林, 李英华, 程晋明, 等. 激光驱动 X 光背光照相技术在金属靶微层裂研究中的应用探索 [J]. 强激光与粒子束, 2016, 28(4): 23–27.
ZHANG L, LI Y H, CHENG J M, et al. Exploration of laser-driven X-ray backlighting applied in research of micro-spalls of metal target [J]. High Power Laser and Particle Beams, 2016, 28(4): 23–27.

[19] SORENSON D S, PAZUCHANICS P, JOHNSON R P, et al. Ejecta particle-size measurements in vacuum and helium gas using ultraviolet in-line Fraunhofer holography: LA-UR-14-24722 [R]. Los Alamos, NM: Lawrence Livermore National Laboratory, 2014.

[20] 叶雁, 汪伟, 李作友, 等. 用高速摄影和脉冲同轴全息照相联合诊断微射流 [J]. 高压物理学报, 2009, 23(6): 471–475.
YE Y, WANG W, LI Z Y, et al. High-speed photography and pulsed in-line holography diagnostics of microjet [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2009, 23(6): 471–475.

[21] 汪伟, 李作友, 李欣竹, 等. 用超高速阴影摄影技术研究微喷射现象 [J]. 应用光学, 2008, 29(4): 526–529.
WANG W, LI Z Y, LI X Z, et al. Study on micro-jet on ultra-high speed shadow photography [J]. Journal of Applied Optics, 2008, 29(4): 526–529.

[22] BUTTLER W T, ORÓ D M, PRESTON D, et al. The study of high-speed surface dynamics using a pulsed proton beam [J]. AIP Conference Proceedings, 2012, 1426: 999–1002.

[23] HAMMERBERG J E, BUTTLER W T, LLOBET A, et al. Proton radiography measurements and models of ejecta structure in shocked Sn [J]. AIP Conference Proceedings, 2018, 1979: 080006.

[24] ZELLNER M B, VUNNI G B. Photon Doppler velocimetry (PDV) characterization of shaped charge jet formation [J]. Procedia Engineering, 2013, 58: 88–97.

[25] FRANZKOWIAK J E, PRUDHOMME G, MERCIER P, et al. PDV-based estimation of ejecta particles' mass-velocity function from shock-loaded tin experiment [J]. Review of Scientific Instruments, 2018, 89(3): 033901.

[26] DE RESSÉGUIER T, LOISON D, LESCOUTE E, et al. Dynamic fragmentation of laser shock-melted metals: some experimental advances [J]. Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2010, 48: 957–972.

[27] 辛建婷, 谷渝秋, 李平, 等. 强激光加载下金属材料微喷回收诊断 [J]. 物理学报, 2012, 61(23): 381–385.
XIN J T, GU Y Q, LI P, et al. Study on metal ejection under laser shock loading [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(23): 381–385.

[28] HE W, XIN J, CHU G, et al. Investigation of fragment sizes in laser-driven shock-loaded tin with improved watershed segmentation method [J]. Optics Express, 2014, 22(16): 18924–18933.

[29] BUTTLER W T, WILLIAMS R J R, NAJJAR F M. Foreword to the special issue on ejecta [J]. Journal of Dynamic Behavior of Materials, 2017, 3(2): 151–155.

[30] 王裴, 何安民, 邵建立, 等. 强冲击作用下金属界面物质喷射与混合问题数值模拟和理论研究 [J]. 中国科学: 物理学 力学

天文学, 2018, 48(9): 106–116.
WANG P, HE A M, SHAO J L, et al. Numerical and theoretical investigations of shock-induced material ejection and ejecta-gas mixing [J]. Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica, 2018, 48(9): 106–116.

[31] 张景琳, 王继海, 杨淑霞. 材料微喷射和动态损伤的分子动力学研究 [J]. 计算物理, 1993, 10(3): 318–324.
ZHANG J L, WANG J H, YANG S X. Molecular dynamics research of ejection and damage of metals induced by reflection of shock wave at free surface [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 1993, 10(3): 318–324.

[32] CHEN J, JING F Q, ZHANG J L, et al. Dynamics simulation of ejection of metal under a shock wave [J]. Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, 14(44): 10833.

[33] CHEN Q F, CAO X L, ZHANG Y, et al. Parallel molecular dynamics simulations of ejection from the metal Cu and Al under shock loading [J]. Chinese Physics Letters, 2005, 22(12): 3151–3154.

[34] HOLIAN B L. Molecular dynamics comes of age for shockwave research [J]. Shock Waves, 2004, 13(6): 489–495.

[35] SHAO J L, WANG P, HE A M, et al. Atomistic simulations of shock-induced microjet from a grooved aluminium surface [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113(15): 153501.

[36] DE RESSÉGUIER T, LESCOUTE E, SOLLIER A, et al. Microjetting from grooved surfaces in metallic samples subjected to laser driven shocks [J]. Journal of Applied Physics, 2014, 115(4): 043525.

[37] 叶建军, 杨健, 郑津洋, 等. 金属材料动态损伤的微观数值模拟 [J]. 江苏大学学报(自然科学版), 2007(1): 41–45.
YE J J, YANG J, ZHENG J Y, et al. Micro-scale numerical simulation on dynamic damage for metal materials [J]. Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition), 2007(1): 41–45.

[38] LI B, ZHAO F P, WU H A, et al. Microstructure effects on shock-induced surface jetting [J]. Journal of Applied Physics, 2014, 115(7): 073504.

[39] DURAND O, SOULARD L. A new method for large scale molecular dynamics simulations of shock induced ejecta [J]. AIP Conference Proceedings, 2012, 1426: 1247–1250.

[40] DURAND O, SOULARD L. Power law and exponential ejecta size distributions from the dynamic fragmentation of shock-loaded Cu and Sn metals under melt conditions [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 114(19): 194902.

[41] HE A M, WANG P, SHAO J L, et al. Molecular dynamics simulations of jet breakup and ejecta production from a grooved Cu surface under shock loading [J]. Chinese Physics B, 2014, 23(4): 047102.

[42] HE A M, WANG P, SHAO J L. Molecular dynamics simulations of ejecta size distributions for shock-loaded Cu with a wedged surface groove [J]. Computational Materials Science, 2015, 98: 271–277.

[43] HE A M, WANG P, SHAO J L. Statistically heterogeneous size distribution of ejecta from shock-loaded Cu with a wedged surface groove [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2016, 24(2): 025002.

[44] WU F C, ZHU Y B, LI X Z, et al. Peculiarities in breakup and transport process of shock-induced ejecta with surrounding gas [J]. Journal of Applied Physics, 2019, 125(18): 185901.

[45] REN G, CHEN Y, TANG T, et al. Ejecta production from shocked Pb surface via molecular dynamics [J]. Journal of Applied Physics, 2014, 116(13): 133507.

[46] SHAO J L, WANG P, HE A M. Microjetting from a grooved Al surface under supported and unsupported shocks [J]. Journal of Applied Physics, 2014, 116(7): 073501.

[47] SHAO J L, WANG P, HE A M. Influence of shock pressure and profile on the microjetting from a grooved Pb surface [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2017, 25(1): 015011.

[48] WU B, WU F C, ZHU Y B, et al. Molecular dynamics simulations of ejecta production from sinusoidal tin surfaces under supported and unsupported shocks [J]. AIP Advances, 2018, 8(4): 045002.

[49] SOULARD L. Molecular dynamics study of the micro-spallation [J]. The European Physical Journal D, 2008, 50(3): 241–251.

[50] XIANG M, HU H, CHEN J, et al. Molecular dynamics simulations of micro-spallation of single crystal lead [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2013, 21(5): 055005.

[51] LIAO Y, XIANG M, ZENG X, et al. Molecular dynamics study of the micro-spallation of single crystal tin [J]. Computational Materials Science, 2014, 95: 89–98.

[52] SHAO J L, WANG P, HE A M, et al. Molecular dynamics study on the failure modes of aluminium under decaying shock loading [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113(16): 163507.

[53] SHAO J L, WANG C, WANG P, et al. Atomistic simulations and modeling analysis on the spall damage in lead induced by

decaying shock [J]. Mechanics of Materials, 2019, 131: 78–83.

[54] 王裴, 秦承森, 张树道, 等. SPH 方法对金属表面微射流的数值模拟 [J]. 高压物理学报, 2004, 18(2): 149–156.
WANG P, QIN C S, ZHANG S D, et al. Simulated microjet from free surface of aluminum using smoothed particle hydrodynamics [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2004, 18(2): 149–156.

[55] WANG P, LI T, SHAO J L, et al. Effect of wave-front width on micro-jet from a shocked aluminum surface [J]. Procedia Engineering, 2011, 10: 3327–3332.

[56] 王裴, 邵建立, 秦承森. 加载波前沿宽度对铝表面微射流的影响 [J]. 物理学报, 2009, 58(12): 1064–1070.
WANG P, SHAO J L, QIN C S. Effect of loading-wave-front width on micro-jet from aluminum surface [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(12): 1064–1070.

[57] 王裴, 邵建立, 秦承森. 沟槽角度对金属表面微射流性质的影响 [J]. 物理学报, 2012, 61(23): 321–327.
WANG P, SHAO J L, QIN C S. Groove angle effect on micro-jet from shocked metal surface [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(23): 321–327.

[58] 赵信文, 李欣竹, 王学军, 等. 金属表面几何缺陷微细结构对微喷射特性的影响 [J]. 物理学报, 2015, 64(12): 285–291.
ZHAO X W, LI X Z, WANG X J, et al. Effects of surface groove micro-structure on ejection from shocked metal surface [J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(12): 285–291.

[59] LIU W B, MA D J, HE A M, et al. Ejecta from periodic grooved Sn surface under unsupported shocks [J]. Chinese Physics B, 2018, 27(1): 016202.

[60] DE RESSÉGUIER T, PRUDHOMME G, ROLAND C, et al. Picosecond x-ray radiography of microjets expanding from laser shock-loaded grooves [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 124(6): 065106.

[61] KULLBACK B A, TERRONES G, CARRARA M D, et al. Quantification of ejecta from shock loaded metal surfaces [J]. AIP Conference Proceedings, 2012, 1426: 995–998.

[62] 刘超, 秦承森, 冯其京, 等. 缺陷形状对铝材料微喷射的影响 [J]. 计算物理, 2016, 26(2): 275–280.
LIU C, QIN C S, FENG Q J, et al. Effect of groove angle on ejecting mass [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2016, 26(2): 275–280.

[63] 刘超, 王裴, 秦承森, 等. 冲击压力及加载速率对沟槽微射流的影响 [J]. 计算物理, 2010, 27(2): 190–194.
LIU C, WANG P, QIN C S, et al. Effect of pressure and shock wave risetime on material ejection [J]. Chinese Journal of Computational Physics, 2010, 27(2): 190–194.

[64] DIMONTE G, TERRONES G, CHERNE F J, et al. Ejecta source model based on the nonlinear Richtmyer-Meshkov instability [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 113(2): 024905.

[65] CHERNE F J, HAMMERBERG J E, ANDREWS M J, et al. On shock driven jetting of liquid from non-sinusoidal surfaces into a vacuum [J]. Journal of Applied Physics, 2015, 118(18): 185901.

[66] DYACHKOV S A, PARSHIKOV A N, ZHAKHOVSKY V V. Shock-produced ejecta from tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods [J]. Journal of Physics: Conference Series, 2015, 653(1): 012043.

[67] DURAND O, JAOUEN S, SOULARD L, et al. Comparative simulations of microjetting using atomistic and continuous approaches in the presence of viscosity and surface tension [J]. Journal of Applied Physics, 2017, 122(13): 135107.

[68] 韩长生. 估算冲击加载下材料自由面微射喷射量的一个半经验解析公式 [J]. 高压物理学报, 1989, 3(3): 234–240.
HAN C S. A semi-empirical equation for estimating the micro-jet ejection from shocked free-surface [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1989, 3(3): 234–240.

[69] GEORGIEVSKAYA A B, RAEVSKY V A. Estimation of spectral characteristics of particles ejected from the free surfaces of metals and liquids under a shock wave effect [J]. AIP Conference Proceedings, 2012, 1426: 1007–1010.

[70] HE A M, LIU J, LIU C, et al. Numerical and theoretical investigation of jet formation in elastic-plastic solids [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 124(18): 185902.

[71] GRADY D E. The spall strength of condensed matter [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1988, 36(3): 353–384.

[72] 石艺娜, 秦承森. 金属射流失稳断裂的理论分析 [J]. 力学学报, 2009, 41(3): 361–369.
SHI Y N, QIN C S. Instability and breakup of stretching metallic jets [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2009, 41(3): 361–369.

［73］ DE RESSÉGUIER T, SIGNOR L, DRAGONR A, et al. Experimental investigation of liquid spall in laser shock-loaded tin [J]. Journal of Applied Physics, 2007, 101(1): 013506.

［74］ 张凤国, 刘军, 王裴, 等. 三角波强加载下延性金属多次层裂破坏问题 [J]. 爆炸与冲击, 2018, 38(3): 659–664.
ZHANG F G, LIU J, WANG P, et al. Multi-spall in ductile metal under triangular impulse loading [J]. Explosion and Shock Waves, 2018, 38(3): 659–664.

［75］ DIMONTE G, TERRONES G, CHERNE F J, et al. Use of Richtmyer-Meshkov instability to infer yield stress at high energy densities [J]. Physical Review Letters, 2011, 107(26): 264502.

Brief Review of Research Progress on Numerical Simulation of Ejection Phenomena

SHAO Jianli[1], HE Anmin[2], WANG Pei[2]

（1. *Key Laboratory of Explosion Science and Technology*, *Beijing Institute of Technology*, *Beijing* 100081, *China*;
2. *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*, *Beijing* 100094, *China*）

Abstract: In this paper, the research progress on numerical simulation of ejection phenomena at home and abroad is briefly reviewed and summarized. Firstly, the characteristics of ejection phenomena and its physical connotation are explained. Then, the molecular dynamics studies and continuum mechanics studies on the two main ejection mechanisms, microjet and microspallation, are respectively summarized. At last, some difficult problems in the numerical study of ejection phenomena are summarized. We hope this paper can provide useful reference for related numerical simulation or modeling research.

Keywords: ejection; shock; molecular dynamics; continuum mechanics

DOI: 10.11858/gywlxb.20180551

<100> LiF 高速冲击变形过程的晶体塑性有限元模拟

刘静楠[1], 叶常青[1], 陈开果[2], 俞宇颖[2], 沈 耀[1]

(1. 上海交通大学金属基复合材料国家重点实验室, 材料科学与工程学院, 上海 200240;
2. 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 四川 绵阳 621999)

摘要: 结合状态方程建立晶体塑性有限元模型, 模拟高速冲击加载条件下<100> LiF 的动态弹塑性大变形行为, 得到应力波剖面特征、动态力学演化规律及其连续介质力学根源。结果表明: 毫米级样品经约 15 GPa 以内的低压冲击, 波剖面具有弹塑性双波响应、弹性前驱衰减和应力松弛现象, 其决定性因素包括样品厚度、外加压力和材料本构; 从连续介质力学角度分析得到, 应力松弛本质上是由于黏性塑性流动, 导致总应变增速小于塑性应变增速, 从而使弹性应变减小、压力降低; 提出用压力关于时间的三阶导数大于零作为判断条件, 对应力波剖面上双波和单波响应的临界压力进行估测, 发现随着样品掺杂浓度的增加, 临界压力增大; 高速冲击变形的温升效应不可忽略, 且温升绝大部分来自弹性体积变形的贡献。

关键词: LiF; 晶体塑性; 状态方程; 应力松弛; 双波响应

中图分类号: O521.2; O347.3 **文献标识码:** A

晶体塑性有限元方法(Crystal Plasticity Finite Element Method, CPFEM)被广泛应用于准静态和动态加载条件下基于晶体微观结构的材料弹塑性变形行为研究。在高压、高应变率极端条件下, 固体材料不再保持线弹性容变关系[1], 基于晶体塑性理论对弹性变形和塑性变形解耦, 结合状态方程(Equation of State, EOS), 可以对材料的非线性弹性响应进行修正[2]。Becker[3]最早将 Murnaghan 状态方程引入唯象 CPFEM 模型, 定性分析了多晶钽在高压、高应变率下的变形规律。在此基础上, De 等[4]在唯象 CPFEM 模型中增加了热中间构型描述材料的热膨胀, 并考虑高应力条件下的声子拖曳与受热控制的热激活两者之间的竞争协调关系, 较准确地模拟了含能材料 α-RDX 高速变形的物质速度波剖面。本研究建模的主要思路是: 采用 Becker 对构型和状态量的简约表达, 融合 De 模型对声子拖曳的考虑, 结合 Murnaghan 状态方程对非线性容变关系的描述以及 Grüneisen 状态方程对热应力的描述, 采用唯象的黏塑性流动方程, 建立 CPFEM 模型, 对 LiF 单晶的冲击力学响应进行模拟研究。

<100> LiF 单晶是目前广泛使用的一种冲击实验窗口材料, 其动态响应特性对待测样品的冲击力学测量结果的影响不可忽略, 因而有必要对它的冲击动态响应进行全面认识。LiF 在常温下具有 NaCl 型晶体结构, 在变形过程中发生屈服后有 6 个{110}<110>主滑移系开动, 高温形变时(高于 700 K), 除主滑移系以外另有 9 个{001}<110>次滑移系开动[5], 本工作的研究范围达不到次滑移系启动温度。Asay 等[6]、Rosenberg 和 Duvall[7]早在 LiF 单晶的冲击加载过程中就观察到应力松弛和弹性前驱衰减现象, 他们基于位错行为展开讨论, 认为这些现象是由位错形核/增殖机制引起, 材料在双波/单波响应下

* 收稿日期: 2018-05-03; 修回日期: 2018-05-28
基金项目: 科学挑战专题(TZ2018001)
作者简介: 刘静楠(1993—), 女, 硕士研究生, 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

的屈服分别与位错的异质/均匀形核相关。现有的对 LiF 冲击变形过程的动态晶体塑性模拟以及对波剖面特征的解释均是基于位错模型展开讨论的，如 Winey 和 Gupta[8]。本研究模拟的主要目标是：采用动态 CPFEM 模拟冲击实验得到的波剖面上的应力松弛和弹性前驱衰减特征，从连续介质力学角度进行分析，为进一步探究位错行为奠定基础。

为此，本研究的主要内容包括：(1)结合状态方程建立动态晶体塑性有限元模型，对 3 种掺杂浓度的<100> LiF 高速冲击动态变形过程进行模拟；(2)分析低压冲击(15 GPa 以内)波剖面上的弹塑性双波响应、弹性前驱幅值衰减和应力松弛现象的连续介质力学根源；(3)根据波剖面的低压双波响应和高压单波响应，估测二者之间的临界压力；(4)考察 0～40 GPa 压力范围内的温升效应。

1　理论和模型

1.1　固体状态方程

根据三项式状态方程的一般形式，固体材料中的压力 p 可分解为“冷”贡献压力、晶格热贡献压力以及自由电子热贡献压力，即

$$p = p_{\mathrm{c}} + p_T = p_{\mathrm{c}} + p_{\mathrm{TN}} + p_{\mathrm{TE}} \tag{1}$$

式中：p_{c}、p_T 分别为冷压和热压，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，自由电子热贡献压力项可忽略，仅在极高压(100 TPa 以上)阶段才需考虑[2]，因此在本研究范围内忽略该部分热压。采用 Murnaghan 状态方程和 Grüneisen 状态方程分别对冷贡献体积应力和晶格热振动引起的热应力进行描述，其标量形式分别表示为

$$p_{\mathrm{Mur}} = \frac{K_0}{K'}\left[\left(\frac{V_0}{V}\right)^{K'} - 1\right] = \frac{K_0}{K'}\left[\exp(-K'\varepsilon_v^{\mathrm{e}}) - 1\right] \tag{2}$$

$$p_{\mathrm{Gru}} = \frac{\Gamma}{V}E_T = \rho_0 \Gamma E_T \tag{3}$$

式中：p_{Mur}、p_{Gru} 分别为 Murnaghan 冷压和 Grüneisen 热压，K_0、K'分别为零压体积模量和体积模量关于压力的一阶导数，V_0、V 分别为零压比容和瞬态比容，$\varepsilon_v^{\mathrm{e}}$为弹性体积应变，$\Gamma$ 为标量形式的 Grüneisen 系数，E_T 为晶格热贡献能量，ρ_0 为零压材料密度。

将状态方程与晶体塑性理论结合的思路是：对于应力中的体积贡献部分，采用 Murnaghan 状态方程进行替换；对于热应力部分，引入 Grüneisen 系数推导变形温度与应力之间的耦合关系。具体的建模过程如下。

1.2　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，首先建立晶体运动学构型，如图 1 所示。

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。对于初始构型中任意物质点，采用 Lagrange 坐标($\boldsymbol{X}$)描述其物质点位置。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 $\boldsymbol{X}$ 的物质点，在现时构型中采用 Euler 坐标($\boldsymbol{x}$)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 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{X}, t)$ 的位置关系。描述材料变形程度的物理量称为变形梯度 $\boldsymbol{F} = \partial \boldsymbol{x}/\partial \boldsymbol{X}$，其物理含义是基于初始构型求取现时构型的梯度张量。

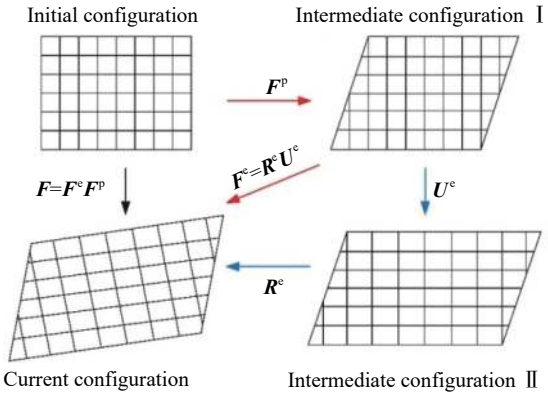


图 1　晶体运动学构型

Fig. 1　Configurations of crystal kinematics

对于现时构型中的物质点运动速度$\boldsymbol{v}=\partial\boldsymbol{x}/\partial t$, 通常定义速度梯度$\boldsymbol{L}=\partial\boldsymbol{v}/\partial\boldsymbol{x}$进行描述。晶体材料由初始构型经变形梯度($\boldsymbol{F}$)变换至现时构型, 如图 1 中的黑色箭头所示。基于晶体材料的弹塑性变形行为, 建立中间构型 I 对弹性和塑性变形进行分解。采用 Asaro[9]对晶体运动学的研究方法, 将变形梯度解耦为

$$\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\cdot\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}} \tag{4}$$

式中: $\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$、$\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$ 分别为弹性和塑性变形梯度。弹性变形包括刚体旋转和晶格畸变, 塑性变形由晶体学滑移引起。材料由初始构型经塑性变形($\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}}$)变换至中间构型 I, 再经弹性变形($\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}$)变换至现时构型, 如图 1 中的红色箭头所示。类似地, 将现时构型中速度梯度张量进行弹、塑性分解

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}+\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}=\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{e}}\cdot\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}-1}+\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{L}_0^{\mathrm{p}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}-1},\quad \boldsymbol{L}_0^{\mathrm{p}}=\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{p}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{p}-1} \tag{5}$$

式中: $\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{e}}$、$\dot{\boldsymbol{F}}^{\mathrm{p}}$分别为弹性和塑性变形梯度的变化率, $\boldsymbol{L}^{\mathrm{e}}$、$\boldsymbol{L}^{\mathrm{p}}$ 分别为现时构型中的弹性和塑性速度梯度, $\boldsymbol{L}_0^{\mathrm{p}}$为中间构型 I 中由晶体学滑移引起的速度梯度, 上标"–1"表示矩阵的逆。对于弹性变形部分, 建立中间构型 II 进一步将其分解为旋转和拉伸变形, 采用线性代数中的极分解

$$\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{e}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{e}} \tag{6}$$

式中: $\boldsymbol{R}^{\mathrm{e}}$ 为旋转张量, $\boldsymbol{U}^{\mathrm{e}}$ 为右拉伸张量。材料由中间构型 I, 经晶格旋转($\boldsymbol{R}^{\mathrm{e}}$)变换至中间构型 II, 再经弹性拉伸($\boldsymbol{U}^{\mathrm{e}}$)变换至现时构型, 如图 1 中蓝色箭头所示。

1.3　超弹性本构

采用弹性对数应变作为超弹性本构方程中的应变度量

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}=\ln\boldsymbol{U}^{\mathrm{e}}=\frac{1}{2}\ln\left(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}\mathrm{T}}\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}}\right) \tag{7}$$

式中: 上标"T"表示矩阵的转置。

通常认为塑性不引起体积改变, 在动态冲击一维应变条件下, 体积应变等于一维弹性应变。因此本研究在弹性变形等价于体积变形的假设条件下, 采用 Hoger[10]针对各向同性材料提出的对数应变的功共轭应力, 即中间构型 II 中共旋应力与弹性变形梯度第三不变量的乘积$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}=\tilde{\boldsymbol{\sigma}}_{\mathrm{II}}\cdot\det(\boldsymbol{F}^{\mathrm{e}})$。

基于微分形式的热力学第一定律和 Clausius-Duhem 不等式对不可逆过程内禀耗散的要求[11], 可以得到共轭的应力-应变之间满足关系

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}=\rho_0\cdot(\partial U/\partial\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}) \tag{8}$$

式中: U 为比内能。采用 Lemaitre 等[12]对弹性的表达形式, 并且考虑到高压冲击过程中材料弹性模量不再保持常数, 将比内能表示为

$$U=\frac{1}{\rho_0}\cdot\frac{1}{2}[\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}:\boldsymbol{C}(p,T):\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}] \tag{9}$$

式中: p、T 分别为动态冲击过程中样品中的压力和变形温度, $\boldsymbol{C}(p, T)$ 为依赖于瞬态压力和温度的弹性模量四阶张量(以下简记为 $\boldsymbol{C}$)。弹性模量对瞬态压力和温度的依赖近似取线性关系

$$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{C}_0+\frac{\partial\boldsymbol{C}}{\partial p}\cdot(p-p_0)+\frac{\partial\boldsymbol{C}}{\partial T}\cdot(T-T_0) \tag{10}$$

式中: $\boldsymbol{C}_0$ 为材料的初始弹性常数, p_0、T_0 分别为冲击过程的初始压力和温度(通常为零压和常温初始条件), $\partial\boldsymbol{C}/\partial p$、$\partial\boldsymbol{C}/\partial T$ 分别为弹性模量关于压力和温度的一阶导数张量。采用 (8) 式、(9) 式和 (10) 式, 结合 Becker[3]、De 等[4]发展的超弹性本构, 在晶体运动学中间构型 II 中建立简单的本构方程

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}=\boldsymbol{C}:\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}:\frac{\partial\boldsymbol{C}}{\partial p}:\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}\right)\frac{\partial p}{\partial\varepsilon_v^{\mathrm{e}}}\boldsymbol{I}+\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}:\frac{\partial\boldsymbol{C}}{\partial T}:\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}\right)\frac{\partial T}{\partial\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}} \tag{11}$$

式中: $\varepsilon_v^{\mathrm{e}}=\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}:\boldsymbol{I}$为体积应变, $\boldsymbol{I}$ 为二阶单位张量。由于压力只改变材料体积而不改变形状, 压力关于应变的一阶导数即为关于弹性体积应变的一阶导数。(11)式中, 等号右侧的 3 项依次表示满足广义胡克定律的线弹性应力-应变关系、因压力对弹性模量的影响引起的应力修正项, 以及因变形温度对弹性模量的影响引起的应力修正项。

分别对(11)式中压力和温度关于弹性应变的一阶导数以及温度随时间的变化率进行推导。首先根据体积模量的定义,得到压力关于体积应变的导数

$$\frac{\partial p}{\partial \varepsilon_v^{\mathrm{e}}} = -K(p) = K_0 + K' p \tag{12}$$

式中:$K(p)$ 为依赖于瞬态压力的体积模量,近似地与压力线性相关。根据 Maxwell 方程、耗散不等式和 Grüneisen 状态方程,可以分别得到温度分别关于弹性应变和时间的一阶导数,即

$$\frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}} = \frac{\partial^2 U}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}} \partial \eta} = T \cdot \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial \tilde{\boldsymbol{\sigma}}}{\partial U} = -T\boldsymbol{\Gamma} \tag{13}$$

$$\dot{T} = -T\boldsymbol{\Gamma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\mathrm{e}} + \frac{\dot{W}^{\mathrm{p}}}{\rho c_V} \tag{14}$$

式中:$\boldsymbol{\Gamma} = \Gamma_{\mathrm{m}} \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Gamma}'$为 Grüneisen 张量,$\Gamma_{\mathrm{m}}\boldsymbol{I}$、$\boldsymbol{\Gamma}'$分别为 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的球量和偏量,根据立方晶体具有晶格振动产生的热量仅引起体积变化而不引起晶格畸变的特点,可知 $\boldsymbol{\Gamma}'$=0;$\dot{W}^{\mathrm{p}}$为单位体积塑性功率,本研究在没有热传导和热源的假设条件下,认为塑性功全部转化为热能;ρ 为材料瞬态密度,c_V 为定容比热容。

在上述超弹性本构方程中引入状态方程,对材料在高压高应变率条件下的非线性弹性容变关系进行描述。首先将应力进行球量和偏量分解,即$\tilde{\boldsymbol{\sigma}} = \tilde{\sigma}_{\mathrm{h}} \boldsymbol{I} + \tilde{\boldsymbol{\sigma}}'$,其中$\tilde{\sigma}_{\mathrm{h}}\boldsymbol{I}$为应力球张量,$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}'$为应力偏张量。进一步将 (11) 式中等号右侧进行分解和重组,整合第 1 项和第 2 项中的纯体积贡献冷应力部分,并采用 Murnaghan 状态方程进行替换,对于第 3 项中温度关于压力的导数引入 Grüneisen 系数并用 (13) 式进行替换。分别得到标量形式的球应力和偏应力张量如下

$$\tilde{\sigma}_{\mathrm{h}} = -p_{\mathrm{Mur}} + \frac{1}{3}\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}\prime} : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{I} + \left[\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}\prime} : \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial p} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}\prime}\right) + \frac{1}{3}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}\prime} : \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial p} : \boldsymbol{I}\right)\varepsilon_v^{\mathrm{e}}\right] \frac{\partial p}{\partial \varepsilon_v^{\mathrm{e}}} - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}} : \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial T} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}\right) T\Gamma_{\mathrm{m}} \tag{15}$$

$$\tilde{\boldsymbol{\sigma}}' = \boldsymbol{\Phi}' : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}\prime} + \frac{1}{3}(\boldsymbol{\Phi}' : \boldsymbol{C} : \boldsymbol{I})\varepsilon_v^{\mathrm{e}} - \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}} : \frac{\partial \boldsymbol{C}}{\partial T} : \boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{e}}\right) T\boldsymbol{\Gamma}' \tag{16}$$

式中:$\boldsymbol{\Phi}' = \boldsymbol{\Phi} - \frac{1}{3}\boldsymbol{I} \otimes \boldsymbol{I}$为四阶单位偏张量,$\boldsymbol{\Phi}$ 为四阶单位张量。(15) 式和 (16) 式能够对动态冲击加载条件下材料的非线性弹性关系,通过状态方程进行较为可靠的描述。下面将对基于晶体微观结构的黏塑性变形建立本构方程。

1.4　晶体塑性本构

根据晶体塑性理论,当外加应力超过弹性极限时,晶体主要以滑移方式进行塑性变形,滑移面和滑移方向合起来称为一个滑移系。(5) 式中采用的由塑性滑移引起的速度梯度张量可表示为

$$\boldsymbol{L}_0^{\mathrm{p}} = \sum\nolimits_{\alpha} \dot{\gamma}^{\alpha} (\boldsymbol{s}_0^{\alpha} \otimes \boldsymbol{m}_0^{\alpha}) \tag{17}$$

式中:$\dot{\gamma}^{\alpha}$为 α 滑移系上的滑移速率,$\boldsymbol{s}_0^{\alpha}$、$\boldsymbol{m}_0^{\alpha}$分别为初始滑移方向和初始滑移面法线上的单位向量。滑移由晶体中的切应力引起,而特定滑移系上的分切应力达到临界值时该滑移系开动,即滑移系上的临界分切应力。一般地,滑移系上的分切应力与晶体材料在加载方向上的应力具有一定的取向关系,可以简单地表示为$\tau^{\alpha} = \sigma \cdot Q^{\alpha}$,其中 Q^{α} 称为取向因子或 Schmid 因子[13]。在本研究范围内,LiF 晶体材料有 6 个{110}<110>滑移系,晶体学中间构型 II 中滑移系 α 上的分切应力(τ^{α})为

$$\tau^{\alpha} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \boldsymbol{Q}_0^{\alpha} = \tilde{\boldsymbol{\sigma}} : \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{U}^{\mathrm{e}} \cdot \boldsymbol{s}_0^{\alpha} \otimes \boldsymbol{m}_0^{\alpha} \cdot \boldsymbol{U}^{\mathrm{e}-1} + \boldsymbol{U}^{\mathrm{e}-1} \cdot \boldsymbol{m}_0^{\alpha} \otimes \boldsymbol{s}_0^{\alpha} \cdot \boldsymbol{U}^{\mathrm{e}}\right) \tag{18}$$

式中:$\boldsymbol{Q}_0^{\alpha}$为中间构型 II 中未经旋转的 Schmid 因子。

宏观材料动力学中,考虑应变率和温度效应的一维黏塑性本构方程的一般形式为$f(\sigma, \varepsilon, \dot{\varepsilon}, T) = 0$[1]。将黏塑性本构方程应用于每个晶体滑移系上的塑性变形中,在滑移系 α 上建立黏塑性流动准则

$$f^{\alpha}\left[\tau^{\alpha}, \hat{\tau}^{\alpha}(\bar{\gamma}, \dot{\gamma}^{\alpha}, T)\right] = \begin{cases} \tau^{\alpha} - \hat{\tau}^{\alpha} = 0 & \dot{\gamma}^{\alpha} \neq 0 \\ \tau^{\alpha} - \hat{\tau}^{\alpha} < 0 & \dot{\gamma}^{\alpha} = 0 \\ \tau^{\alpha} - \hat{\tau}^{\alpha} > 0 & \text{不存在} \end{cases} \tag{19}$$

式中: $\bar{\gamma}=\int_0^t\sum_\alpha|\dot{\gamma}^\alpha|\mathrm{d}t$为所有滑移系上的累积滑移量, $\hat{\tau}^\alpha$为滑移系 α 上的临界分切应力或称为滑移阻力。当滑移系 α 上的分切应力小于临界分切应力时, 该滑移系不发生塑性滑移。随着高压冲击过程样品中切应力的增加, 一旦滑移系上的分切应力达到临界分切应力, 则该滑移系开始发生塑性滑移。

在高压高应变率的冲击变形过程中, 晶体滑移系上的临界分切应力(即滑移阻力)包含晶体内缺陷对位错运动的阻力和声子拖曳造成的黏性阻力两部分[14]。其中前者又包含位错增殖机制造成的硬化部分以及位错湮灭和热软化作用造成的软化部分。结合硬化项($\hat{\tau}_{\mathrm{h}}^\alpha$)、软化项($\hat{\tau}_{\mathrm{s}}^\alpha$)和声子拖曳项($\hat{\tau}_{\mathrm{d}}^\alpha$), 建立唯象的塑性硬化关系$\hat{\tau}^\alpha=\hat{\tau}_{\mathrm{h}}^\alpha\cdot\hat{\tau}_{\mathrm{s}}^\alpha+\hat{\tau}_{\mathrm{d}}^\alpha$。采用高应变速率下的 Steinberg 硬化模型[15]建立幂形式的硬化项; 基于 Arrhenius 方程建立指数形式的软化项; 采用 Kumar 等[14]提出的恒温下线性声子拖曳关系$\tau_{\mathrm{d}}=\theta\dot{\gamma}$, 结合 Nemat-Nasser 等[16]依据实验结果对线性黏性应力的热激活修正, 建立声子拖曳项。因此, 在滑移系 α 上建立唯象的黏塑性硬化方程

$$\hat{\tau}^\alpha=\frac{\mu}{\mu_0}\cdot\tau_0\left\{\left[1+B(\bar{\gamma}+\gamma_0)^n\right]\cdot\left(\frac{|\dot{\gamma}^\alpha|+\dot{\gamma}_{\mathrm{off}}}{\dot{\gamma}_0}\right)^m\exp(-\lambda\Delta E)+\left[1-\exp\left(-\frac{\theta}{\tau_{\mathrm{T}}}\dot{\gamma}^\alpha\right)\right]\right\}\tag{20}$$

式中: μ_0 为初始零压条件下的剪切模量; μ 为材料在冲击变形过程中的瞬态剪切模量, 采用它与弹性模量的近似关系$\mu=[(C_{11}-C_{12})/2+C_{44}]/2$; B 为线性应变硬化参数; n 为应变硬化幂指数; γ_0 为初始塑性滑移量(通常为零), $\dot{\gamma}_{\mathrm{off}}$为滑移系未开动时的率硬化修正参数, $\dot{\gamma}_0$为参考滑移速率; m 为率敏感性指数; λ 为热软化修正系数; ΔE 为比热能; τ_0 为常温零压条件下的参考屈服应力, τ_{T} 为考虑温度效应的材料瞬态参考屈服应力; θ 为线性声子拖曳系数。需要注意的是, 参数 τ_0、n 和 m 对于样品纯净度的依赖较强, 这在后面对不同掺杂浓度样品的冲击变形模拟中有所体现。

1.5　数值方案和有限元模型

采用上述结合状态方程的晶体塑性模型, 利用 Abaqus/Explicit 有限元软件对<100> LiF 样品编写用户自定义材料程序 Vumat 并进行模拟。在有限元数值计算中, 采用的积分方案包括: (1)在总变形时间范围内, 采用前向梯度$\Delta\gamma^\alpha=\gamma_{t+\Delta t}^\alpha-\gamma_t^\alpha$对塑性变形进行积分计算; (2)在每个时间增量步内, 采用完全拉格朗日格式即采用全量的形式更新弹性应变; (3)对 (19) 式采用 Newton-Raphson 迭代计算滑移速率, 每个迭代循环中以滑移增量线性插值$\Delta\gamma^\alpha=\Delta t\left(\dot{\gamma}_t^\alpha+\dot{\gamma}_{t+\Delta t}^\alpha\right)/2$作为预估, 并以$\Delta\bar{\gamma}<10^{-4}$ 作为迭代收敛准则。

飞片-样品-窗口模型如图 2 所示。预先设定飞片以初始速度 v 撞击静止的样品和窗口, 飞片、样品和窗口的厚度相同, 具体的模型信息见表 1。飞片/样品、样品/窗口之间在变形过程中始终无摩擦接触, 为消除边侧稀疏影响, 图 2 所示模型中飞片、样品及窗口的上下表面均施加垂直于飞片撞击方向的约束。时间增量步小于 0.1 ns, 飞片、样品和窗口均采用平面应变减缩积分单元, 单元尺寸小于 15 μm, 经验证明若将单元尺寸缩小一倍, 则$\bar{\gamma}$的最大变化量小于 2×10^{-4}(Newton-Raphson 迭代收敛量级), 因此具有网格收敛性。为节省计算资源, 对飞片和窗口部件没有采用 CPFEM 模型, 而采用 Mises 屈服准则以及各向同性的塑性硬化方程, 并结合 Grüneisen 状态方程对弹性关系的描述, 进行简单的连续介质力学计算。在后续研究中, 对于飞片和窗口部件的冲击变形计算, 将考虑更具有物理意义的方案进行改进。

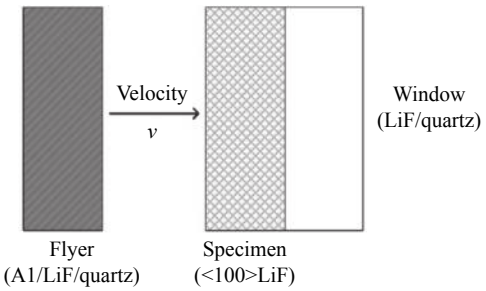


图 2　飞片撞击 LiF 样品模型示意图

Fig. 2　Illustration of the flyer impacting LiF specimen model

2　模拟结果和分析

2.1　材料参数

依据文献中的冲击实验模型[6,17-18]对<100> LiF 进行动态 CPFEM 模拟, 所采用的超弹性本构参数[19-21]如表 2 所示。采用 Nelder 等[22]对传统优化方法——单纯形法(Simplex Algorithm, SA)的改进, 对唯象黏

表 1　模拟中采用的模型信息

Table 1　Model information in simulations

Sample No.	Flyer material	Window material	v/(m·s^{-1})	Sample's thickness/mm	Ref.
LiF01	Al	Quartz	340.0	1.35	[6]
LiF02	Al	Quartz	340.0	1.98	[6]
LiF03	LiF	LiF	423.8	3.0	[17]
LiF04	LiF	LiF	1 321.6	3.0	[17]
LiF05	LiF	LiF	1 641.5	3.0	[17]
LiF06	Fused sillica	Fused sillica	340.9	1.143	[18]
LiF11, LiF12, LiF13	LiF	LiF	340.0	3.0	

Note: LiF01–LiF06 models were built based on the parameters of specimens and experiments in references, while LiF11–LiF13 models were designed for comparison of profile characteristic differences with successively increased specimen doping concentration.

表 2　<100> LiF 的超弹性本构参数

Table 2　Hyperelastic constitutive parameters of <100> LiF

Subscript	C_{ij}/GPa	$\dfrac{\mathrm{d}C_{ij}}{\mathrm{d}p}$	$\dfrac{\mathrm{d}C_{ij}}{\mathrm{d}T}$/(MPa·K^{-1})	K_0/GPa	K_0'	ρ_0/(g·cm^{-3})	c_v/(J·kg^{-1}·K^{-1})	Γ_m
11	113.97	9.97	–75.56					
12	47.67	2.73	–28.39	69.97	4.43	2.64	1 612.02	1.68
44	63.64	1.38	–13.94					

塑性硬化方程进行多元函数非线性最优化计算，即对 (20) 式中的材料参数进行计算，结果如表 3 所示。由于不同实验者采用的 LiF 单晶的掺杂浓度不同，因此材料的晶体塑性本构参数略有差异。在飞片和窗口的简单连续介质力学计算中，涉及包括铝、石英晶体和熔石英等在内的材料参数，采用文献[23-28]中在准静态变形条件下得到的初始（零压）材料参数，以及在动态冲击条件下得到的材料常数对压力和温度的依赖关系。

表 3　<100> LiF 的晶体塑性本构参数

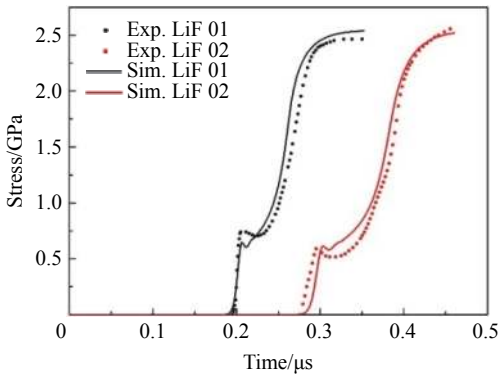
Table 3　Crystal plasticity constitutive parameters of <100> LiF

Sample No.	τ_0/MPa	B	n	$\dot{\gamma}_{\mathrm{off}}$/μs^{-1}	$\dot{\gamma}_0$/μs^{-1}	m	λ	$\dfrac{\tau_\mathrm{T}}{\theta}$/s^{-1}
LiF01, LiF02, LiF11	121.0		0.08					
LiF03, LiF04, LiF05, LiF12	113.9	4.0	0.30	3.5×10^{-9}	0.12	0.09	4.7×10^{-2}	0.15
LiF06, LiF13	86.4		0.40					

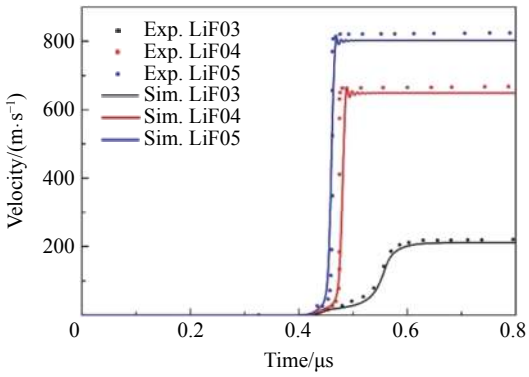
2.2　波剖面特征

将采用 CPFEM 模拟得到的波剖面与文献中通过实验得到的结果进行比对，包括 LiF01、LiF02 沿加载方向的应力波剖面以及 LiF03～LiF06 沿加载方向的物质速度波剖面，如图 3 所示。对比发现，<100> LiF 的低压冲击响应具有如下特征：(1) 弹塑性双波响应，(2) 弹性前驱幅值衰减，(3) 应力松弛现象。从连续介质力学角度进行分析，可以发现 3 个波剖面特征均由如下因素共同决定：样品厚度、加载压力、材料本构。下面将从波剖面 3 个特征的连续介质力学根源以及 3 种因素对波剖面特征的影响进行具体分析。

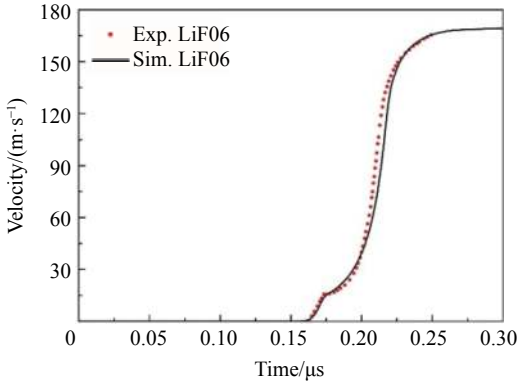
材料在低压冲击加载条件下，弹性波速大于塑性波速，波剖面上弹性波和塑性波两者分离，所以波剖面呈现弹塑性双波结构。由于在高压高应变速率变形过程中，固体材料的塑性流动具有类似于流体



(a) Stress wave profiles of LiF01 and LiF02 models



(b) Velocity wave profiles of LiF03, LiF04 and LiF05 models



(c) Velocity wave profiles of LiF06 model

图 3　CPFEM 模拟的<100> LiF 波剖面与实验的比对结果

Fig. 3　Comparison of wave profiles of <100> LiF from CPFEM simulations and experiments

的黏性特征。增加样品厚度(即应力波在样品中的传播距离)时, 由于黏性效应的累积, 弹性波和塑性波速度的差异增大, 使得波剖面上弹、塑性波之间分离距离增大, 如图 3(a) 所示。增加冲击压力大小, 样品冲击表面处的初始波形斜率增加, 则对于具有相同厚度的样品, 弹、塑性波之间的分离距离减小, 如图 3(b)所示。增加样品掺杂浓度, 由表 3 可知, 材料的晶体塑性本构(参数 τ_0、n 和 m)略有改变, 由于杂质对黏塑性流动具有增强效果, 弹、塑性波之间的分离距离亦增加, 如图 4 所示。

随着应力波在样品中传播距离的增加, 材料的弹性前驱幅值发生衰减, 如图 3(a)所示。根据弹性前驱理论[29], 靠近样品冲击表面处的材料初始响应应当为弹性, 因此材料的初始弹性极限等于加载压力。在高压冲击加载条件下, 加载压力远高于材料在准静态下的屈服强度, 应力波在样品内传播时, 由于塑性流动的黏性效应, 弹性前驱幅值朝着准静态屈服强度的数值方向发生衰减。其衰减程度一方面受近表面处初始弹性极限(即加载压力)影响, 另一方面受应力波传播过程中黏性效应的累积(即样品厚度)影响。在相同冲击压力和样品厚度条件下, 增加样品掺杂浓度(LiF11、LiF12 和 LiF13 的掺杂浓度依次减小)进行冲击模拟, 所得的弹性前驱幅值衰减程度依

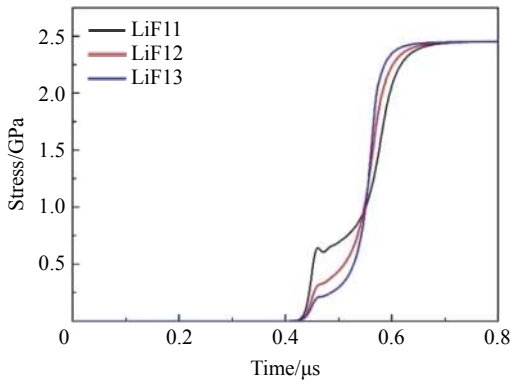


图 4　加载条件和样品厚度相同、样品掺杂浓度不同(LiF11～LiF13, 掺杂浓度依次减小)时模拟的应力波剖面

Fig. 4　Stress wave profiles from models with same loading condition, specimen thickness and different doping concentrations (LiF11–LiF13, with doping concentration decreasing in order)

次减小，如图 4 所示。在相同冲击加载压力下，材料表面处的初始弹性极限相同，当应力波传播至样品相同厚度处，由于不同的杂质原子浓度对材料强化的程度不同，随着样品掺杂浓度的增加，材料的瞬态弹性极限依次增加。因此，材料的初始弹性极限与瞬态弹性极限之差，即弹性前驱幅值衰减程度依次减小。考虑到杂质原子对材料塑性流动中黏性效应的增强，由波剖面模拟结果可知，杂质对材料强度的增加程度超过对黏塑性效应的增强。

波剖面上的稳态峰值应力主要由外加压力决定。当弹塑性波通过样品中的物质点之后，由外加载荷引起的弹塑性变形基本完成，应力和速度波剖面上相应地出现峰值平台。随着外加压力的增大，特定<100> LiF 样品的稳态峰值应力增大，如图 3(b) 所示。而样品厚度和掺杂浓度(即材料本构)的差异，对于材料在相同外加载荷条件下冲击变形稳态峰值应力的影响可以忽略不计，分别如图 3(a) 和图 4 所示。这是因为样品厚度和掺杂浓度对波剖面的影响主要体现为黏塑性流动对波形弥散程度的影响，应力波通过样品之后的最终应力状态由外加载荷确定。

掺杂含量较高的<100> LiF(LiF01、LiF02)经低压冲击后，波剖面上具有明显的应力松弛现象，见图 3(a)。下面将对应力松弛现象的连续介质根源及其影响因素进行具体分析。

2.3　应力松弛现象分析

应力松弛现象可表达为应力关于时间的一阶导数小于零$\left(\dfrac{\partial\sigma}{\partial t}<0\right)$，其中$\dfrac{\partial\sigma}{\partial t}$可以通过 1.3 节中建立的超弹性本构方程推导其在一维应变过程中的标量形式，即

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t}=\left[C+\left(K\frac{\partial C}{\partial p}+T\Gamma\frac{\partial C}{\partial T}\right)\varepsilon^{\mathrm{e}}\right]\cdot\frac{\partial\varepsilon^{\mathrm{e}}}{\partial t}+\left[\frac{\partial C}{\partial p}\varepsilon^{\mathrm{e}}+\frac{1}{2}K'\frac{\partial C}{\partial p}(\varepsilon^{\mathrm{e}})^2\right]\cdot\frac{\partial p}{\partial t}+\frac{1}{2}\Gamma\frac{\partial C}{\partial T}(\varepsilon^{\mathrm{e}})^2\cdot\frac{\partial T}{\partial t}\tag{21}$$

式中：$\dfrac{\partial p}{\partial t}$和$\dfrac{\partial T}{\partial t}$均主要由$\dfrac{\partial\varepsilon^{\mathrm{e}}}{\partial t}$确定，因此应力松弛条件可近似地转化为弹性应变速率$\dfrac{\partial\varepsilon^{\mathrm{e}}}{\partial t}<0$，即总应变速率小于塑性应变速率

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}<\frac{\partial\varepsilon^{\mathrm{p}}}{\partial t}\tag{22}$$

对模拟结果进行数值考察，LiF01 和 LiF02 均满足(22)式。下面分析加载压力、样品厚度和材料本构对(22)式不等号左右两项的具体影响。

总应变速率主要由外加压力和样品厚度决定。一方面，由于样品近冲击表面处的初始响应由加载压力确定，对于具有确定晶体塑性本构的材料，其近表面处的总应变速率亦由加载压力确定。另一方面，增加样品厚度，由于塑性流动过程中累积黏性效应，使得总应变速率随应力波在样品中传播距离的增加而不断减小。

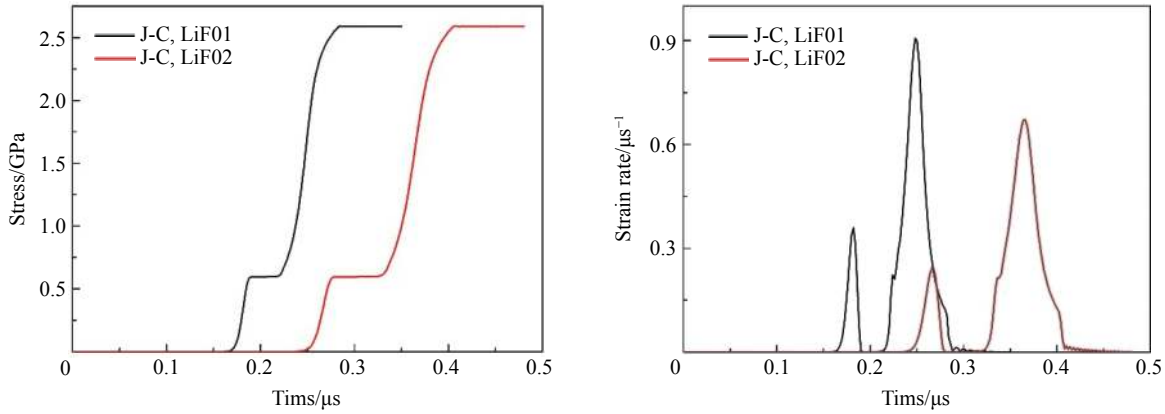
塑性应变速率则主要由晶体热黏塑性本构决定。当样品中应力超过雨贡纽弹性极限，在塑性变形的初期，塑性应变尚未来得及增大至显著应变硬化的阶段，材料的黏塑性使得塑性应变率可能超过总应变率，则弹塑性转变后迅速进入应力松弛阶段。此后随着塑性变形的继续进行，应变硬化对应力波剖面的影响逐渐占据统治地位，即应力松弛之后材料强度的大幅度提高阶段。增加样品掺杂浓度，晶体塑性本构的率敏感性(参数 m)相对于应变硬化(参数 n)对应力影响的权重增加，如表 3 所示。结合(20) 式，变形初期材料塑性应变很小，塑性应变率随率敏感性因子的增加而显著增加。

采用 CPFEM 模拟动态冲击加载的一个重要优势在于，模拟得到的波剖面能够体现应力松弛特征，并能够从连续介质力学角度进行解释，这是简单连续介质力学模型无法实现的。以 Johnson-Cook(J-C) 模型为例，其率相关塑性硬化方程为

$$\sigma=(\sigma_0+B\varepsilon^n)\left(1+A\ln\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}\right)\cdot\sigma(T)\tag{23}$$

式中：σ_0 为参考屈服强度，B、n 为应变硬化参数，A 为应变率硬化参数，$\dot{\varepsilon}$、$\dot{\varepsilon}_0$分别为应变率和参考应变率，$\sigma(T)$ 是仅与变形温度相关的热软化项。采用 J-C 模型对 LiF01 和 LiF02 进行模拟验证，得到的应力波剖面和应变率历史如图 5 所示。弹塑性转变后应变率由 0.1 μs^{-1} 数量级迅速下降至 10^{-4} μs^{-1} 数量级，

应力波剖面上保持一段平台，而不会出现应力下降现象。应力无法松弛包括两方面原因：一方面，在采用 J-C 模型的连续介质力学计算中，屈服条件为 Mises 准则，而不是黏塑性流动准则，例如本研究所建立的(19)式；另一方面，J-C 模型的率硬化本构方程形式过于简单，无法描述波剖面上应力下降的现象[30]。J-C 模型无法模拟应力松弛现象进一步佐证了晶体塑性模型中的黏塑性流动是低压冲击条件下应力松弛的关键原因。



(a) Stress wave profiles　　(b) Strain-rate history

图 5　采用 Johnson-Cook 本构方程对 LiF01、LiF02 模型的模拟结果

Fig. 5　Simulation results of LiF01 and LiF02 models using Johnson-Cook constitutive equation

2.4　双波响应临界压力

材料在高压高应变率变形过程中，一方面相对于纯弹性变形阶段的波速(简称弹性波速)而言，材料经过弹塑性转变开始发生塑性变形，使得塑性阶段波速(简称塑性波速)减小；另一方面，由(10)式可知，随着样品内压力的增加，材料瞬态弹性模量增加，对塑性波速有增加的作用。基于以上两方面对塑性波速的竞争影响，当材料受到特定的冲击压力加载时，如果塑性波速小于弹性波速，则具有双波响应；如果塑性波速大于弹性波速，则具有单波响应。如上所述，对于具有确定厚度和材料本构的冲击样品，其弹性波速和塑性波速之间的大小关系由加载压力决定，因此材料的双波和单波响应之间具有临界压力。

采用 CPFEM 对不同飞片撞击速度下<100> LiF 的冲击变形行为进行模拟，估测双波响应和单波响应的临界压力。考虑到冲击波的单波响应要求塑性波加速追赶上弹性波，即要求波剖面上的斜率加速上升，可以采用压力关于时间的三阶导数大于零作为判断依据，模拟 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 模型在不同冲击压力下的应力波剖面，如图 6 所示。计算得到的双波和单波响应临界压力为 22.0～22.6 GPa，与李雪梅等[17]根据实验外推的 22～23 GPa 临界压力区间一致，可见采用压力的三阶导数大于零作为判据时结果具有合理性。相反地，如果波剖面斜率的增速出现先增加后减小再增加的趋势，则认为具有双波响应特征。对 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 模型在 13.4 GPa 加载条件下进行模拟，如图 7 所示。图 7 中出现明显的斜率增速很小的阶段(*AB* 段)，算得该阶段压力关于时间的二阶导数始终大于零，而三阶导数小于零，可见压力关于时间的二阶导数不足

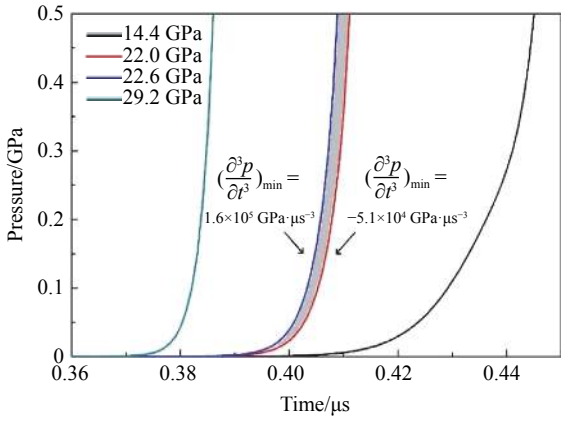


图 6　LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 双波和单波响应的临界压力

Fig. 6　Critical pressure of two-wave and one-wave response of LiF03–LiF05 and LiF12 models

以描述双波响应特征。采用二阶导数大于零评判双波响应压力上限时所得结果与基于实验的外推结果相差较大，进一步表明采用压力关于时间的三阶导数估测双波和单波响应的临界压力是合理的。

以压力关于时间的三阶导数大于零作为评判依据，进一步算得 LiF11 的双波和单波响应的临界压力为 24.0～24.6 GPa，LiF13 的临界压力为 16.0～16.5 GPa。可见，随着对 LiF13、LiF12 和 LiF11 模型中样品掺杂浓度的依次升高，双波和单波响应的临界压力依次增大。这是由于杂质使塑性流动的黏性效应增强，因此相同厚度样品中的塑性波速超过弹性波速所需要的外加压力更高。

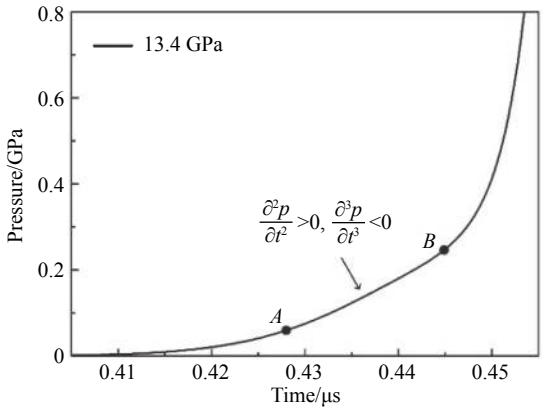


图 7　模拟 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 在 13.4 GPa 压力下的双波响应

Fig. 7　Two-wave response of LiF03–LiF05 and LiF12 models under 13.4 GPa pressure by simulation

2.5　温升现象

晶体材料在高压高应变率下的冲击变形的另一个重要特征是力学变形和温度升高的热力耦合作用。采用本研究建立的考虑热效应的动态 CPFEM 模型，对 LiF03、LiF04、LiF05 和 LiF12 在 0～40 GPa 压力范围内的冲击变形进行模拟，得到样品内温度随压力的变化，如图 8 所示。随着压力的增加，LiF 样品中的变形温度升高，当压力达到 40 GPa 时，温度升高 155.4 K，温升效应不可忽略。与准静态变形不同，高应变率下材料常数对温度的依赖进一步影响弹性变形，并引入 Grüneisen 状态方程用于描述热应力。根据 (14) 式对温升的计算，得到温升的贡献绝大部分（98% 以上）来源于弹性体积变形，而塑性功对温升的贡献较小。

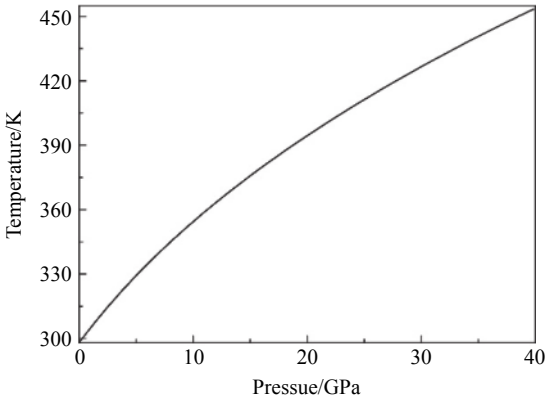


图 8　模拟 LiF03、LiF04、LiF05、LiF12 在 0～40 GPa 冲击压力范围内温度随压力的响应

Fig. 8　Temperature responding to pressure ranging from 0 to 40 GPa of LiF03–LiF05 and LiF12 models by simulation

3　结　论

为研究<100> LiF 单晶在高速冲击条件下的动态响应，结合状态方程建立动态晶体塑性有限元模型，对它的应力波及其传播过程进行模拟和分析，得到如下结论：

（1）该模型能够较好地模拟实验测得的应力和物质速度波剖面，并能够反映波剖面上弹塑性双波响应、应力松弛以及弹性前驱幅值衰减特征；

（2）能够从连续介质力学角度对应力松弛现象进行解释，为进一步采用位错模型进行分析提供更多可能性；

（3）提出采用压力关于时间的三阶导数大于零的判断方法估测 LiF 单晶的弹塑性双波和单波响应的临界压力，为减小冲击实验中窗口材料对待测样品测量结果的影响提供参考；

（4）能够反映温度升高与力学变形之间的耦合响应。

参考文献：

[1] 王礼立, 胡时胜, 杨黎明, 等. 材料动力学 [M]. 合肥:中国科学技术大学出版社, 2017: 7-9, 111-113.

[2] 经福谦. 实验物态方程导引 [M]. 2 版. 北京: 科学出版社, 1999: 7-26.
[3] 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.
[4] DE S, ZAMIRI A R. 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.
[5] GILMAN J J. Plastic anisotropy of LiF and other rocksalt-type crystals [J]. Acta Metallurgica, 1959, 7(9): 608–613.
[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] ROSENBERG G, DUVALL G E. Precursor amplitudes in LiF from shocks propagating in <111> directions [J]. Journal of Applied Physics, 1980, 51(1): 319–330.
[8] WINEY J M, GUPTA Y M. Nonlinear anisotropic description for the thermomechanical response of shocked single crystals: inelastic deformation [J]. Journal of Applied Physics, 2006, 99(2): 023510.
[9] ASARO R J. Micromechanics of crystals and polycrystals [J]. Advances in Applied Mechanics, 1983, 23(8): 1–115.
[10] HOGER A. The stress conjugate to logarithmic strain [J]. International Journal of Solids and Structures, 1987, 23(12): 1645–1656.
[11] 黄克智. 固体本构关系 [M]. 北京: 清华大学出版社, 1999: 205-208.
[12] LEMAITRE J, CHABOCHE J L. Mechanics of solids materials [M]. Cambrige: Cambridge University Press, 1990: 311-313.
[13] ASARO R J, RICE J R. Strain localization in ductile single crystals [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1977, 25(5): 309–338.
[14] KUMAR A, HAUSER F E, DORN J E. Viscous drag on dislocations in aluminum at high strain rates [J]. Acta Metallurgica, 1968, 16(9): 1189–1197.
[15] 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.
[16] NEMAT-NASSER S, GUO W G, KIHL D P. Thermomechanical response of AL-6XN stainless steel over a wide range of strain rates and temperatures [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2001, 49(8): 1823–1846.
[17] 李雪梅, 俞宇颖, 张林, 等. <100>LiF 的低压冲击响应和 1 550 nm 波长下的窗口速度修正 [J]. 物理学报, 2012, 61(15): 156202.
LI X M, YU Y Y, ZHANG L, et al. Elastic-plastic response of shocked (100) LiF and its window correction at 1 550 nm wavelength [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(15): 156202.
[18] ASAY J R, HICKS D L, HOLDRIDGE D B. Comparison of experimental and calculated elastic-plastic wave profiles in LiF [J]. Journal of Applied Physics, 1975, 46(10): 4316–4322.
[19] MILLER R A, SMITH C S. Pressure derivatives of the elastic constants of LiF and NaF [J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1964, 25(12): 1279–1292.
[20] 于锦泉, 肖亚斌, 周显明, 等. 冲击压缩下单晶 LiF 高压声速及卸载路径研究 [J]. 高压物理学报, 2005, 19(3): 206–212.
YU J Q, XIAO Y B, ZHOU X M, et al. Study on sound velocity and unloading path for single crystal LiF under shock compression [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2005, 19(3): 206–212.
[21] ANDERSSON S, BACKSTROM G. Thermal conductivity and heat capacity of single-crystal LiF and CaF_2 under hydrostatic pressure [J]. Journal of Physics C: Solid State Physics, 1987, 20(35): 5951.
[22] NELDER J A, MEAD R. A simplex method for function minimization [J]. The Computer Journal, 1965, 7(4): 308–313.
[23] YAO S L, PEI X Y, YU J D, et al. A dislocation-based explanation of quasi-elastic release in shock-loaded aluminum [J]. Journal of Applied Physics, 2017, 121(3): 035101.
[24] NEWTON M D, O'KEEFFE M, GIBBS G V. *Ab initio* calculation of interatomic force constants in $H_6Si_2O_7$ and the bulk modulus of α quartz and α cristobalite [J]. Physics and Chemistry of Minerals, 1980, 6(4): 305–312.
[25] GRAHAM R A. Shock-wave compression of *x*-cut quartz as determined by electrical response measurements [J]. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1974, 35(3): 355–372.
[26] RAMMO N N, FARID S B. Thermal expansion coefficients and Grüneisen parameters of quartz at high temperature by X-ray method [J]. Powder Diffraction, 1994, 9(2): 148–150.
[27] MEADE C, JEANLOZ R. Frequency-dependent equation of state of fused silica to 10 GPa [J]. Physical Review B, 1987, 35(1):

236.

[28] BOGARDUS E H. Third-order elastic constants of Ge, MgO, and fused SiO_2 [J]. Journal of Applied Physics, 1965, 36(8): 2504–2513.

[29] JOHNSON J N, JONES O E, MICHAELS T E. Dislocation dynamics and single-crystal constitutive relations: shock-wave propagation and precursor decay [J]. Journal of Applied Physics, 1970, 41(6): 2330–2339.

[30] DING J L, ASAY J R, AO T. Modeling of the elastic precursor behavior and dynamic inelasticity of tantalum under ramp wave loading to 17 GPa [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 107(8): 083508.

Crystal Plasticity Finite Element Simulation of High-Rate Shock Deformation Process of <100> LiF

LIU Jingnan[1], YE Changqing[1], CHEN Kaiguo[2], YU Yuying[2], SHEN Yao[1]

(1. *The State Key Lab of Metal Matrix Composites*, *School of Material Science and Engineering*, *Shanghai Jiao Tong University*, *Shanghai* 200240, *China*;
2. *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics*, *Institute of Fluid Physics*, *CAEP*, *Mianyang* 621999, *China*)

Abstract: A crystal plasticity finite element model combined with equation of state was built to simulate the dynamic elastic-plastic large deformation behavior of <100> LiF under high-rate shock loading. The characterization of the stress wave profile, the patterns of the dynamic mechanical evolution and their essential causes in view of the continuum mechanics were obtained through simulations, with the following results achieved: (1) the wave profiles of millimeter-sized specimens exhibit elastic-plastic two-wave response, elastic precursor decay and stress relaxation below 15 GPa; (2) in view of continuum mechanics, the stress relaxation is essentially due to the viscous plastic flow which accounts for the increase rate of the total strain being less than that of the plastic strain, and which further reduces the elastic strain and pressure; (3) the third derivative of pressure to time being greater than zero was proposed as a criterion for estimating the critical pressure of the two-wave and the one-wave response of the stress wave profile, and the estimation result indicated that the critical pressure increased with the increase of the doping concentration in specimen; (4) the effect of temperature rise during the high-rate shock deformation is non-negligible, and the elastic volumetric deformation contributes to most of the temperature rise.

Keywords: LiF; crystal plasticity; equation of state; stress relaxation; two-wave response

DOI: 10.11858/gywlxb.20180613

A New Approach for the Failure of Metallic Materials

ZHOU Lin, WEN Heming

(*CAS Key Laboratory for Mechanical Behavior and Design of Materials*, *University of Science and Technology of China*, *Hefei* 230027, *China*)

Abstract: A new approach is presented herein to predict the failure of metallic materials. A failure criterion that caters for the effects of stress triaxiality and Lode parameter is proposed and it is applicable not only to metals with $\bar{e}_{\mathrm{f}} > e_{\mathrm{f}}$ but also to metals with $\bar{e}_{\mathrm{f}} \leqslant e_{\mathrm{f}}$, here $\bar{e}_{\mathrm{f}}$ and e_{f} are the two parameters defined as the true strains at stress triaxiality of $\eta = 1/3$ for Lode parameters of $\xi = 1$ (axisymmetric stress state) and $\xi = 0$ (plane strain state) respectively. Furthermore, only two laboratory tests such as smooth bar tension test and pure shear test are needed to calibrate the failure criterion. The present failure criterion is proved in good agreement with the test data for various metals under different loading conditions.

Keywords: failure criterion; metallic material; stress triaxiality; Lode parameter; smooth bar tension test; pure shear test

CLC number: O346 **Document code:** A

Rapid progress of computer technology and computing technique in recent years has made it possible to apply numerical simulations to the study of response and failure of structures under different loading conditions. As structural failure is usually caused by its material failure, it is, therefore, essential to develop a criterion that can both accurately predict the material failure and be aptly implemented in a numerical model.

Johnson and Cook[1-2] proposed a constitutive model which included a damage function to estimate the fracture of metallic materials. The fracture criterion is a function of hydrostatic pressure (stress triaxiality), strain rate and temperature but does not depend on the third invariant of the deviatoric stress tensor. Furthermore, the influence of stress triaxiality on the material ductility was also investigated by others[3-5]. It was found that the material ductility decreases as stress triaxiality increases.

Wierzbicki *et al.*[6] assessed the effectiveness and accuracy of 7 fracture criteria for metallic materials. It was demonstrated that the stress triaxiality alone cannot sufficiently characterize the effect of stress state on ductile fracture and that the effect of the Lode angle needs to be taken into account. Xue[7] further considered the joint effects of pressure and Lode angle on the ductile fracture and defined a fracture envelope in principal stress space and, in particular, suggested two kinds of Lode dependence functions. Bai and Wierzbicki[8] proposed an uncoupled material model for metal plasticity and ductile fracture in which the failure criterion was of the asymmetric three dimensional fracture locus as compared to the previously suggested symmetric ones. Later on, Bai and Wierzbicki[9] suggested a general form of asymmetric ductile fracture which represents an extension to the

* **Received date:** 2018-08-09; **Revised date:** 2018-08-27

Biography: ZHOU Lin (1988—), female, doctoral student, major in impact dynamics.
E-mail: zlxzh@mail.ustc.edu.cn

Corresponding author: WEN Heming(1965—), male, Ph.D, professor, major in impact dynamics.
E-mail: hmwen@ustc.edu.cn

Mohr-Coulomb failure criterion. Meanwhile, other authors[10-12] also investigated the effect of Lode angle on the ductile fracture.

It should be mentioned here that comments made on the general formulation in terms of interdependence on hydrostatic and deviatoric state are valid for any material. However, there are two problems which need to be addressed. The first one is that there are often too many coefficients which need to be determined from laboratory tests and the second is that the average values of stress triaxiality and Lode angle were used in constructing a fracture locus instead of the actual values of these two parameters.

The objective of the present paper is to propose a new approach for the failure of metallic materials which is dependent on both stress triaxiality and Lode angle. It is applicable not only to metals with $\bar{e}_{\rm f}>e_{\rm f}$ but also to metals with $\bar{e}_{\rm f}\leqslant e_{\rm f}$, here $\bar{e}_{\rm f}$ and $e_{\rm f}$ are the two parameters defined as the true strains at stress triaxiality of η=1/3 for Lode parameters of ξ=1 (axisymmetric stress state) and ξ=0 (plane strain state) respectively. Furthermore, only two laboratory tests such as smooth bar tension test and pure shear test are needed to calibrate the failure criterion. The new failure criterion is compared with available material test data and discussed.

1　Formulation of a New Approach

A new approach is proposed in the following which can be used to predict the failure of metallic materials under different loading conditions by considering effects of both stress triaxiality and Lode angle. Firstly, some parameters are defined and then the new approach is formulated; finally, a failure criterion is given in which only two parameters are needed for determination from two laboratory tests.

1.1　Definition of $\bar{e}_{\rm f},\gamma_{\rm f},e_{\rm f}^{*}$ and $\bar{\gamma}_{\rm f},e_{\rm f},\gamma_{\rm f}^{*}$

For a metallic material, a criterion considering the effects of both stress triaxiality η and Lode angle parameter ξ is needed to predict its failure. η and ξ are defined by the following equations

$$\eta=\frac{\sigma_{\rm m}}{\bar{\sigma}}=\frac{I_1}{3\sqrt{3}J_2^{1/2}} \tag{1}$$

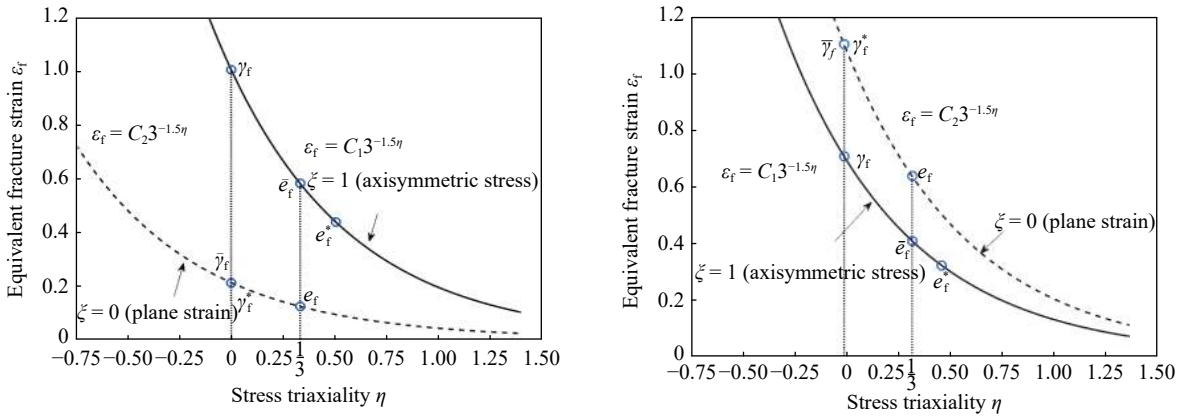
$$\xi=\frac{27}{2}\frac{J_3}{\bar{\sigma}^3}=\frac{3\sqrt{3}J_3}{2J_2^{3/2}} \tag{2}$$

where $\sigma_{\rm m}=(\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3)/3$, $\bar{\sigma}=\sqrt{\left[(\sigma_1-\sigma_2)^2+(\sigma_2-\sigma_3)^2+(\sigma_1-\sigma_3)^2\right]/2}$ are mean and equivalent stresses, respectively, with σ_1, σ_2 and σ_3 as the principal stresses; $I_1=\sigma_1+\sigma_2+\sigma_3$ represents the first invariant of the stress tensor; $J_2=\left[(\sigma_1-\sigma_2)^2+(\sigma_2-\sigma_3)^2+(\sigma_3-\sigma_1)^2\right]/6$ and $J_3=(\sigma_1-\sigma_{\rm m})(\sigma_2-\sigma_{\rm m})(\sigma_3-\sigma_{\rm m})$ are the second and third invariants of the stress deviator tensor, respectively. The Lode angle parameter ξ is related to the Lode angle θ on the π plane through $\xi=-\sin(3\theta)$ and the range of the Lode angle is $-\pi/6\leqslant\theta\leqslant\pi/6$. Hence, ξ takes values of $-1\leqslant\xi\leqslant1$.

Fig.1 shows the definition of various parameters in the space of fracture strain $\varepsilon_{\rm f}$ versus stress triaxiality η where two scenarios are considered, namely, materials with $\bar{e}_{\rm f}>e_{\rm f}$ as shown schematically in Fig.1(a) and materials with $\bar{e}_{\rm f}\leqslant e_{\rm f}$ as shown schematically in Fig.1(b). Here $\bar{e}_{\rm f}$ designates the theoretical value of axisymmetric stress state (*i.e.* tension with $\eta=1/3$, $\xi=1$), $\gamma_{\rm f}$ represents the theoretical value of axisymmetric stress state (*i.e.* shear with $\eta=0$, $\xi=1$) which can be taken as $\gamma_{\rm f}=\sqrt{3}\bar{e}_{\rm f}$; $\bar{\gamma}_{\rm f}$ represents the theoretical value of plane strain state (*i.e.* shear with $\eta=0$, $\xi=0$), $e_{\rm f}$ indicates the theoretical value of plane strain state (*i.e.* tension with $\eta=1/3$, $\xi=0$) which can be taken as $e_{\rm f}=\bar{\gamma}_{\rm f}/\sqrt{3}$; $e_{\rm f}^{*}$ is the experimentally obtained true fracture strain in a smooth bar tension test ($\xi=1$) and $\gamma_{\rm f}^{*}$ is the experimentally measured shear strain in a torsion test ($\xi=0$).

For a constant Lode angle (*i.e.* ξ = constant), the relationship between equivalent fracture strain and stress triaxiality can be expressed as an exponential function[13]. Moreover, the theoretical value of fracture strain in shear

($\eta = 0$) is $\sqrt{3}$ times that in tension ($\eta = 1/3$) (Johnson and Cook[1]). It can be easily shown that the relationship between equivalent fracture strain ε_f and stress triaxiality η take the form of $\varepsilon_f = C_1 e^{-1.5(\ln 3)\eta}$ for $\xi = 1$ after using $\gamma_f = \sqrt{3}\bar{e}_f$ and for $\xi = 0$ it takes the form of $\varepsilon_f = C_2 e^{-1.5(\ln 3)\eta}$ after using $\bar{\gamma}_f = \sqrt{3}e_f$ as shown in Fig.1.

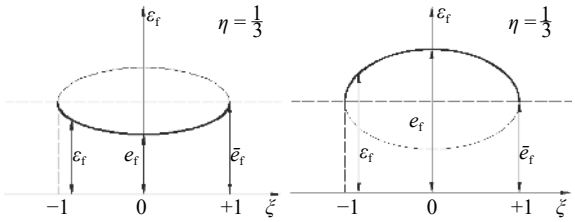


(a) Metallic materials with $\bar{e}_f > e_f$ (b) Metallic materials with $\bar{e}_f \leqslant e_f$

Fig. 1 Definition of parameters in the space of ε_f and η

1.2 A New Approach

It has been found experimentally that some more ductile metals such as OFHC cooper have a larger equivalent strain to fracture in shear than that in tension whilst some less ductile metals such as 4340 steel and 2024-T351 aluminum alloy have a smaller equivalent strain to fracture in shear than that in tension (see Johnson and Cook[2] and Wierzbicki *et al.*[6] for more details). In the following, a new approach is suggested for the failure of a metallic material on the basis of the discussion in Section 1.1 where two scenarios are considered depending upon the relative magnitude of $\bar{e}_f$ and e_f (Fig.2).



(a) Scenario I: $\bar{e}_f > e_f$ (b) Scenario II: $\bar{e}_f \leqslant e_f$

Fig. 2 Schematic diagrams of the failure loci for metallic materials in the space of ε_f and ξ for η=1/3

1.2.1 Scenario I: $\bar{e}_f > e_f$

The failure locus for a metallic material with $\bar{e}_f > e_f$ in the space of ε_f and ξ for $\eta = 1/3$ can be represented by the lower part of an elliptic curve as shown schematically in Fig.2(a), which can be described by the following equation

$$\left(\frac{\varepsilon_f - \bar{e}_f}{\bar{e}_f - e_f}\right)^2 + \xi^2 = 1 \tag{3}$$

Hence, the equivalent fracture strain can be rewritten as

$$\varepsilon_f = \bar{e}_f - (\bar{e}_f - e_f)(1 - \xi^2)^{1/2} \tag{4}$$

after taking it into consideration that ε_f is less than $\bar{e}_f$.

1.2.2 Scenario II: $\bar{e}_f \leqslant e_f$

As shown schematically in Fig.2(b), the failure locus for a metallic material with $\bar{e}_f \leqslant e_f$ in the space of ε_f and ξ for $\eta = 1/3$ can be represented by the upper part of an elliptic curve, which can be described by the following expression

$$\left(\frac{\varepsilon_f - \bar{e}_f}{e_f - \bar{e}_f}\right)^2 + \xi^2 = 1 \tag{5}$$

Hence, the equivalent fracture strain can be recast into the following form

$$\varepsilon_{\mathrm{f}} = \bar{e}_{\mathrm{f}} + (e_{\mathrm{f}} - \bar{e}_{\mathrm{f}})(1-\xi^2)^{1/2} \tag{6}$$

or

$$\varepsilon_{\mathrm{f}} = \bar{e}_{\mathrm{f}} - (\bar{e}_{\mathrm{f}} - e_{\mathrm{f}})(1-\xi^2)^{1/2} \tag{7}$$

It is noted from Eq.(4) and Eq.(7) that no matter what scenario it is the equivalent fracture strain takes the same form. It is also noted here that $\bar{e}_{\mathrm{f}}$ and e_{f} are the specific points on the failure curves for $\xi = 1$ and $\xi = 0$, respectively and, hence, they must satisfy the corresponding equations, namely, $\bar{e}_{\mathrm{f}} = C_1 \mathrm{e}^{-1.5(\ln 3)\eta}$ and $e_{\mathrm{f}} = C_2 \mathrm{e}^{-1.5(\ln 3)\eta}$. Substituting $\bar{e}_{\mathrm{f}} = C_1 \mathrm{e}^{-1.5(\ln 3)\eta}$ and $e_{\mathrm{f}} = C_2 \mathrm{e}^{-1.5(\ln 3)\eta}$ into Eq.(4) or Eq.(7) and rearranging yield

$$\varepsilon_{\mathrm{f}}(\eta,\xi) = \left[C_1 - (C_1 - C_2)(1-\xi^2)^{1/2}\right] \times 3^{-1.5\eta} \tag{8}$$

where C_1, C_2 are constants to be determined from laboratory material tests.

1.3 Determination of C_1, C_2

A criterion for the failure of a metallic material (Eq.(8)) has been developed which is a function of both stress triaxiality and Lode angle parameter. The two constants, *i.e.* C_1, C_2 can be estimated from two laboratory material tests such as smooth bar tension test and pure shear test.

For the smooth bar tension test, the Lode angle parameter $\xi = 1$ and the experimentally obtained true fracture strain is $\varepsilon_{\mathrm{f}} = e_{\mathrm{f}}^*$ and its corresponding stress triaxiality is $\eta = \eta^*$. Substituting these values into Eq.(8) and rearranging it, we arrive at $C_1 = 3^{1.5\eta^*} e_{\mathrm{f}}^*$. Similarly, for the pure shear test, the Lode angle parameter is $\xi = 0$ and the experimentally obtained critical shear strain is $\varepsilon_{\mathrm{f}} = \gamma_{\mathrm{f}}^*$ and its corresponding stress triaxiality can be approximated as $\eta = 0$. Substituting these values into Eq.(8) and rearranging it, we have $C_2 = \gamma_{\mathrm{f}}^*$.

2 Comparison with Test Data and Discussion

The failure criterion developed in Section 1 is compared with the test data for various metallic materials under different loading conditions as reported in the literature. As discussed above only two laboratory material tests are needed to determine the values of e_{f}^* (the true fracture strain in tension), γ_{f}^* (the critical rupture strain in shear) and η^* (the stress triaxiality corresponding to e_{f}^*). In the following, the procedures for calculating the values of these 3 parameters are first briefly described and then the newly developed failure criterion (Eq.(8)) is compared with the available experimental results for various metallic materials.

For a smooth bar tensile test, the equivalent true plastic strain to fracture in the necking cross-section of the smooth round bar can be approximately calculated by the following equation

$$e_{\mathrm{f}}^* = 2\ln(d_0/d_{\mathrm{f}}) \tag{9}$$

where d_0 is the initial diameter and d_{f} is the minimum cross-section diameter at fracture. For a pure shear (*i.e.* tubular torsion) test, the equivalent true strain to fracture can be calculated by the following expression

$$\gamma_{\mathrm{f}}^* = R\varphi/L \tag{10}$$

where R is the initial radius of tubular torsion specimens, L is the initial length of the gage section and φ is the average rotation angle to fracture found in the measured torque-rotation curves.

The value of stress triaxiality η^* which corresponds to the equivalent true fracture strain e_{f}^* in a smooth bar tension test is obtained by the following method, as shown schematically in Fig.3 which shows variation of stress triaxiality with equivalent true strain in a smooth

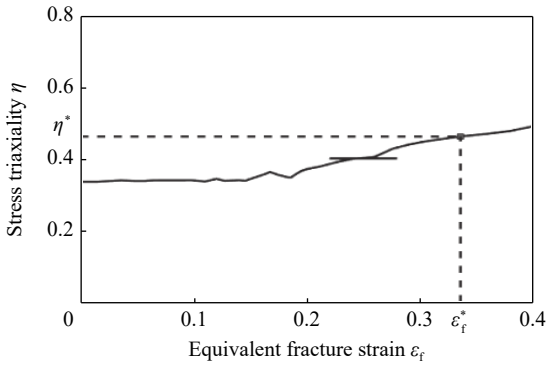


Fig. 3　Definition of the stress triaxiality corresponding to the true fracture strain in a smooth bar tension test

bar under tensile loading[14]. As can be seen from Fig.3, the stress triaxiality is not a constant during the entire tensile deformations. Before the necking occurs the deformations in the gauge length are nearly uniform and the stress triaxiality remains almost constant, namely, the theoretical value of 1/3; after the necking occurs the stress triaxiality is no longer a constant but varies with the tensile deformations due to a change in stress state in the necking section. As shown in Fig.3, it is straightforward to determine the value of η^* since e_f^* has been estimated from the smooth bar tension tests using Eq.(9).

Comparisons are made in Fig.4–Fig.9 between the newly developed failure criterion (Eq.(8)) and the test data available for different ductile metals under different loading conditions. In Fig.4–Fig.9, the broken line and the dotted line represent Eq.(8) with $\xi = 1$ and $\xi = 0$, respectively. The results from the two laboratory tests (*i.e.* smooth bar tension test and pure shear test) as presented in Fig.4–Fig.9(a) and those (*i.e.* smooth bar tension test and plane strain flat bar test) as given in Fig.9(b) which are used to determine the values of two constants C_1, C_2 in Eq.(8) can be viewed as calibration data and all the other test results as verification data.

Fig.4 shows comparison between the newly developed failure criterion (Eq.(8)) and the experimental data for the 4340 steel as reported by Johnson and Cook[2] who conducted 4 types of laboratory material tests including the smooth bar tension test, tubular torsion test and two notched tension tests. In the calculation, the value of γ_f^* is obtained directly from the tubular torsion test data in Fig.12 of Johnson and Cook [2] and it is equal to 0.253 6 (*i.e.* $\gamma_f^* = 0.2536$); Similarly, the value of e_f^* is determined to be $e_f^* = 1$ from the smooth bar tension test data in Fig.6 of Johnson and Cook[2] and the value of η^* is estimated to be $\eta^* = 0.7220$ from Fig.11 of Johnson and Cook[2]. It is easy to calculate the values of the constants C_1 and C_2 in Eq.(8) and prove them to be $C_1 = 3^{1.5\eta^*} e_f^* = 3.2864$ and $C_2 = \gamma_f^* = 0.2536$ using the values of relevant parameters as obtained above. It can be seen that the present model predictions are in good agreement with the experimental results for the 4340 steel. Furthermore, it is easy to show that $e_f = 0.1464$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 0$) and $\bar{e}_f = 1.8974$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 1$). Hence, by definition the 4340 steel as examined in Johnson and Cook[2] belongs to Category I material since $\bar{e}_f > e_f$ as discussed in Section 1.1.

Fig.5 shows comparison of the present model (Eq.(8)) with the experimental data for the Armco iron as reported by Johnson and Cook[2] who conducted 4 types of laboratory material tests including smooth bar tension test, tubular torsion test and two notched tension tests. In the calculation, the value of γ_f^* is obtained directly from the tubular torsion test data in Fig.12 of Johnson and Cook[2] and it is equal to 2.915 0 (*i.e.* $\gamma_f^* = 2.9150$); Similarly, the value of e_f^* is determined to be $e_f^* = 1.8670$ from the smooth bar tension test data in Fig.6 of Johnson and Cook[2] and the value of η^* is estimated to be $\eta^* = 0.8150$ from Fig.11 of Johnson and Cook[2]. It is easy to calculate the values of the constants C_1 and C_2 in Eq.(8) to be $C_1 = 3^{1.5\eta^*} e_f^* = 7.1520$ and $C_2 = \gamma_f^* = 2.9150$ using

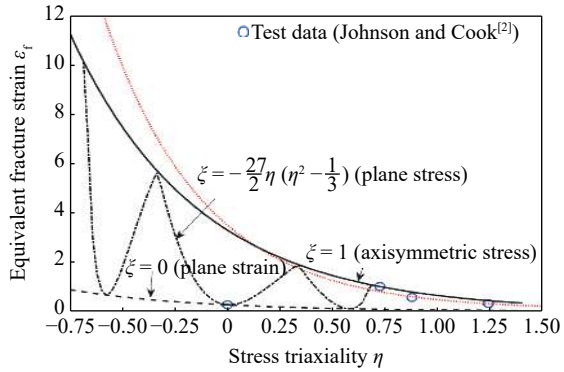


Fig. 4 Comparison of the newly developed failure criterion with the test data for 4340 steel (Johnson and Cook[2]) in the space of ε_f and η. Red line: Johnson-Cook failure criterion[2]; black lines: the present model (Eq.(8))

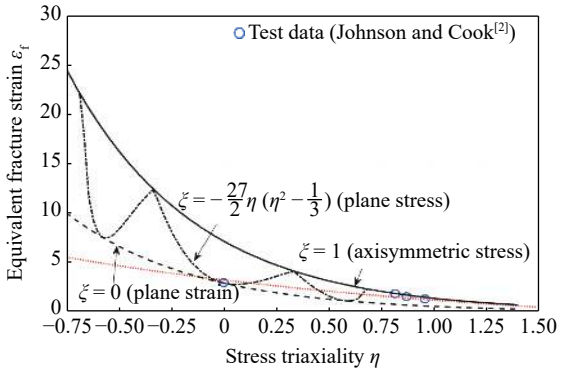


Fig. 5 Comparison of the newly developed failure criterion with the test data for Armco iron (Johnson and Cook[2]) in the space of ε_f and η. Red line: Johnson-Cook failure criterion[2]; black lines: the present model (Eq.(8))

the values of relevant parameters as obtained above. It is evident that the present model predictions are in good agreement with the experimental results for the Armco iron. Moreover, it is easy to show that $e_{\rm f}=1.683\,0$ (Eq.(8) with $\eta=1/3,\xi=0$) and $\bar{e}_{\rm f}=4.129\,2$ (Eq.(8) with $\eta=1/3,\xi=1$). By definition the Armco iron as investigated in Johnson and Cook[2] belongs, therefore, to Category I material since $\bar{e}_{\rm f}>e_{\rm f}$ as discussed in Section 1.1.

Fig.6 shows comparison between Eq.(8) and the test results for the OFHC copper as reported by Johnson and Cook[2] who performed 4 types of laboratory material tests including smooth bar tension test, tubular torsion test and two notched tension tests. In the calculation, the value of $\gamma_{\rm f}^*$ is taken to be 8.700 0 (i.e. $\gamma_{\rm f}^*=8.700\,0$) which was obtained from the torsion test on another shorter-gage specimen (Johnson and Cook[2]). This is because none of the OFHC copper specimens fractured due to rotational limitations of the torsion tester as pointed out by Johnson and Cook. On the other hand, the value of $e_{\rm f}^*$ is determined to be $e_{\rm f}^*=1.448\,0$ from the smooth bar tension test data in Fig.6 of Johnson and Cook[2] and the value of η^* is estimated to be $\eta^*=0.730\,0$ from Fig.11 of Johnson and Cook[2]. It is easy to calculate the values of the constants C_1 and C_2 in Eq.(8) to be $C_1=3^{1.5\eta^*}e_{\rm f}^*=4.821\,9$ and $C_2=\gamma_{\rm f}^*=8.700\,0$ using the values of relevant parameters as obtained above. It is shown that the present model predictions are in good agreement with the experimental results for the OFHC copper. Furthermore, it is easy to show that $e_{\rm f}=5.022\,9$ (Eq.(8) with $\eta=1/3$, $\xi=0$) and $\bar{e}_{\rm f}=2.783\,9$ (Eq. (8) with $\eta=1/3$, $\xi=1$). Hence, by definition the Armco iron as examined in Johnson and Cook[2] belongs to Category II material since $\bar{e}_{\rm f}\leqslant e_{\rm f}$ as discussed in Section 1.1.

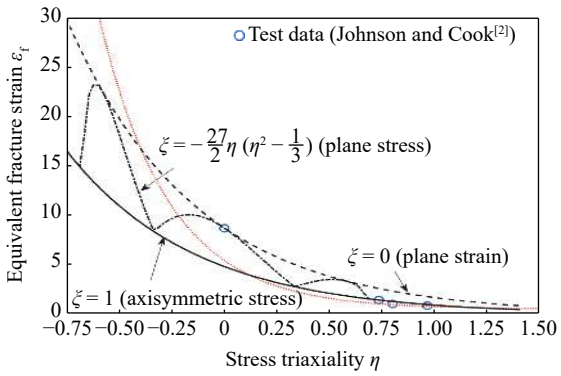


Fig. 6　Comparison of the newly developed failure criterion with the test data for OFHC copper (Johnson and Cook[2]) in the space of $\varepsilon_{\rm f}$ and η. Red line: Johnson-Cook failure criterion[2]; black lines: the present model (Eq.(8))

Fig.7 shows comparison of Eq.(8) with the test data for the 1045 steel as studied by Bai *et al.*[15] who carried out 6 types of laboratory material tests including smooth bar tension test, tubular torsion test, notched bar tension test and 3 flat grooved plane strain tests. In the calculation, the value of $\gamma_{\rm f}^*$ is obtained from the tubular torsion test and directly taken from Eq.(24) of Bai *et al.*[15] to be 0.480 0 (i.e. $\gamma_{\rm f}^*=0.480\,0$); the value of $e_{\rm f}^*$ is taken be $e_{\rm f}^*=0.426\,9$ directly from Table 2 of Bai *et al.*[15] for the smooth bar tension test which was calculated using Eq.(13) of Bai *et al.*[15] and the value of η^* is estimated to be $\eta^*=0.599\,0$ from Fig.18 of Bai *et al.*[15]. It is easy to calculate the values of the constants C_1 and C_2 in Eq.(8) to be $C_1=3^{1.5\eta^*}e_{\rm f}^*=1.145\,6$ and $C_2=\gamma_{\rm f}^*=0.480\,0$ using the values of relevant parameters as obtained above. It is demonstrated that the present model predictions are in good agreement with the experimental results for the 1045 steel. Furthermore, it is easy to show that $e_{\rm f}=0.277\,1$ (Eq.(8) with $\eta=1/3,\xi=0$) and $\bar{e}_{\rm f}=0.661\,4$ (Eq.(8) with $\eta=1/3,\xi=1$). Hence, by definition the 1045 steel as studied in Bai *et al.*[15] belongs to Category I material since $\bar{e}_{\rm f}>e_{\rm f}$ as discussed in Section 1.1.

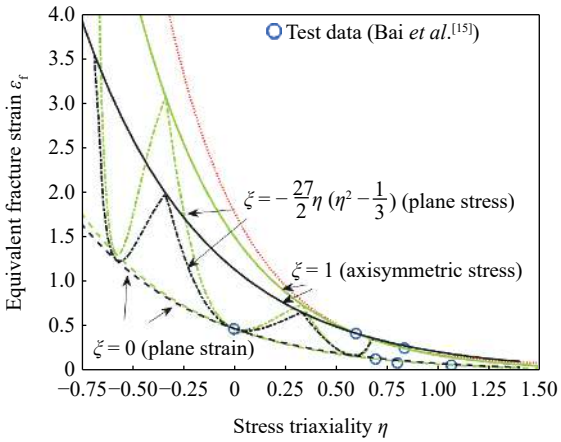


Fig. 7　Comparison of the newly developed failure criterion with test data for 1045 steel (Bai *et al.*[15]) in the space of $\varepsilon_{\rm f}$ and η. Red line: Johnson-Cook failure criterion[2]; green lines: model proposed by Xue and Wierzbicki[6]; black lines: the present model (Eq.(8))

Fig.8 shows comparison of the newly developed failure criterion (Eq.(8)) with the test data for 2024-T351 aluminum alloys as reported by Wierzbicki *et al.*[6] and Bao[14] who conducted 15 types of laboratory material tests.

In the calculation, the value of γ_f^* is obtained directly from the shear test data in Table 1 of Bai *et al.*[9] and it is equal to 0.210 7 (*i.e.* $\gamma_f^* = 0.210\,7$); the value of e_f^* is determined to be $e_f^* = 0.4375$ from the smooth bar tension test data in Fig.8 of Wierzbicki *et al.*[6] and the value of η^* is estimated to be $\eta^* = 0.5050$ from Fig.5.18 of Bao[14]. Hence, the values of the constants C_1 and C_2 in Eq. (8) can be easily calculated to be $C_1 = 3^{1.5\eta^*} e_f^* = 1.0055$ and $C_2 = \gamma_f^* = 0.2107$ using the values of relevant parameters as obtained above. It is evident from Fig.8 that the present model predictions are in good agreement with the experimental results for the 2024-T351 aluminum alloy. Moreover, it is easy to show that $e_f = 0.1216$ (Eq. (8) with $\eta = 1/3, \xi = 0$) and $\bar{e}_f = 0.5805$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 1$). By definition the 2024-T351 aluminum as investigated in Wierzbicki *et al.*[6] and Bao[14] belongs, therefore, to Category I material since $\bar{e}_f > e_f$ as discussed in Section 1.1.

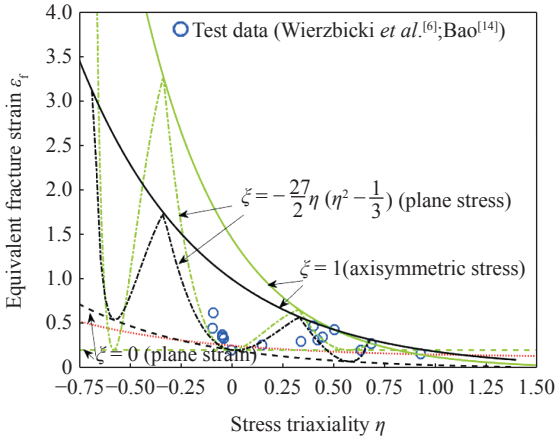
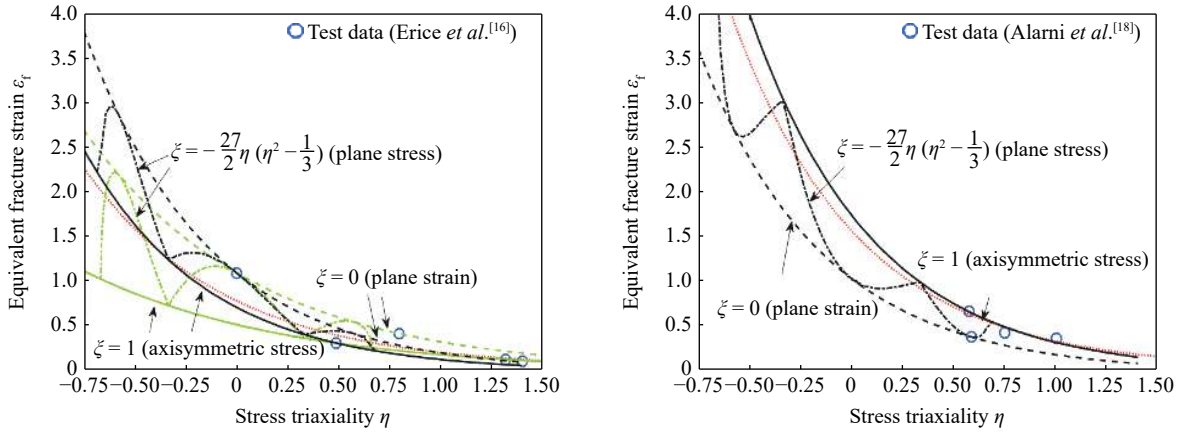


Fig. 8　Comparison of the newly developed failure criterion with the test data for 2024-T351 aluminum alloy (Wierzbicki *et al.*[6]; Bao[14]) in the space of ε_f and η. Red line: Johnson-Cook failure criterion[2]; green lines: the model proposed by Xue and Wierzbicki[6]; black lines: the present model (Eq.(8))

Fig.9(a) shows comparison of the newly developed failure criterion (Eq.(8)) with the test data for Inconel 718 nickel-base superalloy as reported by Erice *et al.*[16-17] who conducted 5 types of laboratory material tests including smooth bar tension test, shear test, plane strain test and two notched tension tests. In the calculation, the value of γ_f^* is obtained directly from the shear test data in Table 3 of Erice *et al.*[16] and it is equal to 1.100 0 (*i.e.* $\gamma_f^* = 1.1000$); Similarly, the value of e_f^* is determined to be $e_f^* = 0.3200$ from the smooth bar tension test data in Table 3 of Erice *et al.*[16] and the value of η^* is estimated to be $\eta^* = 0.4899$ from Fig.14(a) of Erice *et al.*[16]. It is easy to calculate the values of the constants C_1 and C_2 in Eq. (8) to be $C_1 = 3^{1.5\eta^*} e_f^* = 0.7174$ and $C_2 = \gamma_f^* = 1.1000$ using the values of relevant parameters as obtained above. It can be seen that the present model predictions (Eq.(8)) are in good agreement with the experimental results for the Inconel 718 nickel-base superalloy as examined by Erice *et al.*[16]. Furthermore, it is easy to show that $e_f = 0.6351$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 0$) and $\bar{e}_f = 0.4142$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 1$). Hence, by definition the Inconel 718 nickel-base superalloy as examined in Erice *et al.*[16-17] belongs to Category II material since $\bar{e}_f \leqslant e_f$ as discussed in Section 1.1.



(a) The test results by Erice *et al.*[16]　　(b) The test data by Algarni *et al.*[18]

Fig. 9　Comparison of the newly developed failure criterion with the test data for Inconel 718 nickel-base superalloy in the space of ε_f and η. Red line: Johnson-Cook failure criterion[2]; green lines: the model proposed by Xue and Wierzbicki[6]; black lines: the present model (Eq.(8))

Comparison is made in Fig.9(b) between the Eq.(8) with the test data for Inconel 718 nickel-base superalloy as reported by Algarni *et al.*[18] who performed 4 types of laboratory material tests including smooth bar tension test, plane strain flat bar test and two notched bar tension tests. As no pure shear or tubular torsion test was done and the value of the constant C_2 needs to be calibrated by other plane strain ($\xi = 0$) flat bar test data as reported in Algarni *et al.*[18] in the calculation. From Table 8 of Algarni *et al.*[18] and Fig.10 of Algarni *et al.*[18], it is easy to get the value of the experimental true fracture strain (0.400 4) and the corresponding computed stress triaxiality (0.583 1). Hence, it is easy to show that $C_2 = 1.0465$; Similarly, from the smooth bar tension test data in Table 8 of Algarni *et al.*[18], it is easy to get the value of the true fracture strain (0.680 4) and the corresponding stress triaxiality (0.573 8) from Fig.10 of Algarni *et al.*[18]. Hence, It is easy to calculate the values of the constants C_1 in Eq.(8) to be $C_1 = 1.7516$. It can be seen that the present model predictions are in good agreement with the experimental results for the Inconel 718 nickel-base superalloy as examined by Algarni *et al.*[18]. Furthermore, it is easy to show that $e_f = 0.6042$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 0$) and $\bar{e}_f = 1.0113$ (Eq.(8) with $\eta = 1/3, \xi = 1$). Hence, by definition the Inconel 718 nickel-base superalloy as examined in Algarni *et al.*[18] belongs to Category I material since $\bar{e}_f > e_f$ as discussed in Section 1.1.

It appears from Fig.9(a) and Fig.9(b) that the results obtained for the 718 nickel-base superalloy materials investigated by Erice *et al.*[16] and Algarni *et al.*[18] are contradictory to each other. It should be mentioned here that the Inconel 718 nickel-base superalloy employed by Erice *et al.*[16-17] was much more ductile than that used by Algarni *et al.*[18]. Closer examination reveals that the discrepancy between these two Inconel 718 nickel-base superalloy materials may be due to different heat treatment (for example, the superalloy used by Erice *et al.*[16] was precipitation hardened) and different chemical composition (for instance, the superalloy employed by Algarni *et al.*[18] had Fe).

Also shown in Fig.4–Fig.9 are the fracture loci for the plane stress state (as indicated by the black solid line) which are predicted theoretically by the present model with ξ being replaced by the following expression

$$\xi = -\frac{27}{2}\eta\left(\eta^2 - \frac{1}{3}\right) \tag{11}$$

As can be seen, some of the shapes of the fracture loci for the plane stress state as shown in Fig.4, Fig.5, Fig.7, Fig.8 and Fig.9(b) open upward whilst the others as shown in Fig.6 and Fig.9(a) open downward. This is no surprising since the plane stress state is only a special case of the present model which divides materials into two categories, *i.e.* Category I material with $\bar{e}_f > e_f$ and Category II material with $\bar{e}_f \leqslant e_f$.

The predictions from the Johnson-Cook failure criterion[2] and the model suggested by Xue and Wierzbicki[6] are also shown in Fig.7, Fig.8, Fig.9(a) whilst in Fig.4, Fig.5, Fig.6 and Fig.9(b) only the predictions from the Johnson-Cook failure criterion are given and those from the model proposed by Xue and Wierzbicki are not available due to lack of test data. The values of the empirical constants D_1–D_3 in the Johnson-Cook failure criterion[2] and c_1–c_4 in the model proposed by Xue and Wierzbicki[6] are evaluated and listed in Table 1. It is clear from these figures that the Johnson-Cook failure criterion has failed to give consistent results and this is not surprising since it does not taken into account the effect of Lode angle. It is also clear from these figures that the present model (Eq.(8)) and the model proposed by Xue and Wierzbicki[6] produce more or less similar results for stress triaxiality greater than zero approximately whilst for stress triaxiality less than zero the difference between these two model predictions increases with decreasing stress triaxiality. It should be mentioned here that only two standard laboratory material tests (*i.e.* smooth bar tensile test and pure shear (tubular torsion) test) are needed to calibrate the two empirical constants in the present model whereas at least two axisymmetric tests (*i.e.*, two notched tensile tests) and two plane strain tests (namely, pure shear test and flat dog-bone tensile test) are required to estimate the four empirical constants in the model suggested by Xue and Wierzbicki[6].

Table 1 Values of constants in the Johnson-Cook failure criterion[2] and the model proposed by Xue and Wierzbicki[6]

Materials	Johnson-Cook failure criterion			Model proposed by Xue and Wierzbicki			
	D_1	D_2	D_3	c_1	c_2	c_3	c_4
4340 steel	0.05[2]	3.44[2]	–2.12[2]				
Armco iron	–2.20[2]	5.43[2]	–0.47[2]				
OFHC copper	0.54[2]	4.89[2]	–3.03[2]				
1045 steel	0.06	1.72	–2.58	1.511 0	2.110 2	0.480 0	1.738 8
2024-T351	0.13[6]	0.13[6]	–1.50[6]	1.466 0	2.394 0	0.210 0	0.005 0
Inconel 718[16]	0.04[16]	0.75[16]	–1.45[16]	0.525 1	1.010 9	1.100 0	1.188 7
Inconel 718[18]	0.04	1.54	–1.60				

3 Conclusions

A new approach has been presented in this paper to predict the failure of metallic materials with the main conclusions achieved.

(1) On the basis of the test data metals can be divided into two categories, namely metals with $\bar{e}_f > e_f$ and metals with $\bar{e}_f \leqslant e_f$, here $\bar{e}_f$ and e_f are the two parameters defined as the true strains at stress triaxiality of η=1/3 for Lode parameters of ξ=1 (axisymmetric stress state) and ξ=0 (plane strain state), respectively.

(2) A new failure criterion, which takes into account the effects of stress triaxiality and Lode parameter, has been obtained.

(3) This newly developed failure criterion has been shown to accord well with the test data for various metals under different loading conditions.

(4) Only two laboratory tests such as the smooth bar tension test and the pure shear (tubular torsion) test are needed to calibrate the failure criterion.

References:

[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]//Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics, 1983, 21: 541-547.

[2] JOHNSON G R, COOK W H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures [J]. Engineering Fracture Mechanics, 1985, 21(1): 31–48.

[3] ALVES M, JONES N. Influence of hydrostatic stress on failure of axisymmetric notched specimens [J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 1999, 47(3): 643–667.

[4] BØRVIK T, HOPPERSTAD O S, BERSTAD T. On the influence of stress triaxiality and strain rate on the behaviour of a structural steel. Part II. numerical study [J]. European Journal of Mechanics A/Solids, 2003, 22(1): 15–32.

[5] BAO Y, WIERZBICKI T. On fracture locus in the equivalent strain and stress triaxiality space [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2004, 46(1): 81–98.

[6] WIERZBICKI T, BAO Y, LEE Y W. Calibration and evaluation of seven fracture models [J]. International Journal of Mechanical Sciences, 2005, 47(4): 719–743.

[7] XUE L. Damage accumulation and fracture initiation in uncracked ductile solids subject to triaxial loading [J]. International Journal of Solids and Structures, 2007, 44(16): 5163–5181.

[8] BAI Y, WIERZBICKI T. A new model of metal plasticity and fracture with pressure and Lode dependence [J]. International Journal of Plasticity, 2008, 24(6): 1071–1096.

[9] BAI Y, WIERZBICKI T. Application of extended Mohr-Coulomb criterion to ductile fracture [J]. International Journal of Fracture, 2010, 161(1): 1–20.

[10] CHOCRON S, ERICE B, ANDERSON C E. A new plasticity and failure model for ballistic application [J]. International Journal of Impact Engineering, 2011, 38(8): 755–764.
[11] BRÜNIG M, CHYRA O, ALBRECHT D. A ductile damage criterion at various stress triaxialities [J]. International Journal of Plasticity, 2008, 24: 1731–1755.
[12] MALCHER L, PIRES F M A, SÁ J M A C D. An extended GTN model for ductile fracture under high and low stress triaxiality [J]. International Journal of Plasticity, 2014, 54(2): 193–228.
[13] RICE J R, TRACEY D. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields [J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 1969, 17(3): 201–217.
[14] BAO Y. Prediction of ductile crack formation in uncracked bodies [D]. Boston, Massachusetts: Massachusetts Institute of Technology, 2003.
[15] BAI Y, TENG X, WIERZBICKI T. On the application of stress triaxiality formula for plane strain fracture testing [J]. Journal of Engineering Materials and Technology, 2009, 131(2): 021002.
[16] ERICE B, GÁLVEZ F. A coupled elastoplastic-damage constitutive model with Lode angle dependent failure criterion [J]. International Journal of Solids and Structures, 2014, 51(1): 93–110.
[17] ERICE B, PÉREZ-MARTÍN M, GÁLVEZ F. An experimental and numerical study of ductile failure under quasi-static and impact loadings of Inconel 718 nickel-base superalloy [J]. International Journal of Impact Engineering, 2014, 69: 11–24.
[18] ALGARNI M, BAI Y, YOUNGSIK C. A study of Inconel 718 dependency on stress triaxiality and Lode angle in plastic deformation and ductile fracture [J]. Engineering Fracture Mechanics, 2015, 147: 140–157.

金属材料失效分析的新方法

周　琳，文鹤鸣

（中国科学技术大学中科院材料力学行为和设计重点实验室，安徽 合肥　230027）

摘要：提出了一种预测金属材料失效的新方法，该失效准则考虑了应力三轴度和 Lode 角参数的影响。将金属材料分为 $\bar{e}_{\mathrm{f}}>e_{\mathrm{f}}$ 和 $\bar{e}_{\mathrm{f}}\leqslant e_{\mathrm{f}}$ 两类，其中 $\bar{e}_{\mathrm{f}}$ 和 e_{f} 分别定义为应力三轴度 $\eta=1/3$、Lode 角参数 $\xi=1$（轴对称应力状态）和应力三轴度 $\eta=1/3$、Lode 角参数 $\xi=0$（平面应变状态）时的真实应变。另外只需要两个常见的实验（光滑圆杆拉伸试验和纯剪试验）数据就可以确定失效准则的参数值。将该新失效准则与文献中报道的诸多材料在不同加载条件下的实验数据进行对比，结果吻合较好。

关键词：失效准则；金属材料；应力三轴度；Lode 角参数；光滑圆杆拉伸试验；纯剪试验

中图分类号：O346　　**文献标识码：**A

DOI: 10.11858/gywlxb.20180665

铜粉末动态压缩行为的多颗粒有限元分析

彭克锋[1], 潘 昊[2], 赵 凯[1], 郑志军[1], 虞吉林[1]

(1. 中国科学技术大学近代力学系中国科学院材料力学行为和设计重点实验室, 安徽 合肥 230026;
2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 颗粒金属材料的宏观力学性能与其细观特性密切相关, 金属粉末的冲击压缩问题有待深入研究。选用实验结果较为丰富的铜粉末作为研究对象, 基于多颗粒有限元法建立了颗粒金属材料的二维数值分析模型, 研究了铜粉末在冲击压缩下的力学行为。数值计算结果表明, 在较高速度冲击下颗粒金属材料呈现出高度局部化的变形带, 变形带如同冲击波一样从冲击端向支撑端传播。利用速度场计算方法, 计算得到了塑性冲击波波阵面的位置, 进而获得了不同孔隙率(0.25～0.60)铜粉末的粒子速度与冲击波波速之间的 Hugoniot 关系, 其在较高冲击速度(200～300 m/s)下与实验结果吻合较好。发展了以动态锁定应变为唯一参数的冲击波模型, 较好地表征了铜粉末在较高速度冲击下的 Hugoniot 关系和波后应力。

关键词: 颗粒金属材料; 冲击压缩; 多颗粒有限元法; 冲击波模型; Hugoniot 关系

中图分类号: O347.5 **文献标识码:** A

颗粒金属材料具有多尺度、孔隙度、流动性及一定强度等特性, 已被广泛应用于许多重要工业领域, 例如航空航天、自动化、电子[1–2]。颗粒金属经过冲击压缩可以制备出不同性能的材料, 因此金属粉末压实越来越受到工业制造领域的关注[3]。相较于传统的压实方法, 冲击压缩可以将粉末快速熔化、快速固化, 压缩得更加密实[4–5]。国内外学者从 20 世纪 80 年代开始对颗粒金属材料的冲击压缩行为进行研究, 但其冲击压缩过程的力学响应尚未得到很好的理解, 而这恰恰是颗粒金属材料设计和应用的关键问题, 尤为必要进行深入研究。

颗粒金属材料的冲击压缩过程历时短、反应迅速, 且粒子直径很小, 准确捕捉其响应特征较为困难[6–8]。一些学者以单质金属粉末、金属粉末混合物作为研究对象, 借助温度压力传感器等瞬态测试工具, 通过高速飞片冲击试验对材料冲击前、后的初态和终态进行测定[9–10]。然而, 实验测试难以获得压缩过程的响应信息。近来, 大量数值模拟方法从细观角度出发研究颗粒材料的冲击压缩行为, 如欧拉流体动力学方法、有限元法、离散元法, 主要研究的不均匀颗粒材料包括铝[11]、铜[12]、多晶铁[13]、铍[14]等。连续介质有限元方法可以表征局部相对密度分布、应力分布和粉末流动, 但由于粉末是不均匀的, 不能从粒子尺度表征颗粒接触和相互作用。离散元方法能弥补上述缺点, 可从颗粒水平观察力学响应, 但由于简化了粒子接触算法, 所以不适用于压实过程。多颗粒有限元方法[15–17]集成以上两种方法的优点, 适用于完全压实过程且能很好地阐明颗粒局部变形及力链传递。

已有的一些理论模型可以用来描述颗粒金属材料的动态压缩行为。压力-孔隙比 (P-α) 模型[18] 仅需要定义参数α, 即孔隙材料与基体材料体积之比, 就可以捕捉到压力随孔隙比的变化关系。P-α模型通过引入α的方式成功分离孔穴压溃和基体压缩的影响, 但是α的演化关系需要额外补充。经验性的球壳压溃模型[6] 随后被发展, 该模型提出包含惯性项的空穴压溃方程, 成功应用于静水压加载, 压力为准

* 收稿日期: 2018-10-18; 修回日期: 2018-11-23
基金项目: 科学挑战专题(TZ2018001); 中央高校基本科研业务费专项资金(WK2480000003)
作者简介: 彭克锋(1994—), 男, 博士研究生, 主要从事材料动态响应数值模拟研究. E-mail: pkf@mail.ustc.edu.cn
通信作者: 郑志军(1979—), 男, 博士, 副教授, 主要从事材料动态响应数值模拟研究. E-mail: zjzheng@ustc.edu.cn

静态和惯性相关项之和。基于球壳压溃模型，许多学者对其进行修正，分别引入偏应力[7]、温度[19]、黏性[20]、微惯性[21] 的影响。然而，大部分模型都是基于经验提出的，直接得到动态的应力-应变关系在实验上是困难的，而细观有限元模型可以得到局部应力-应变信息。因此，本研究采用细观有限元模拟冲击压缩过程，研究颗粒金属材料的冲击压缩模型。

本研究采用多颗粒有限元方法，从粒子层次建立颗粒金属材料的二维细观有限元模型，研究在恒速冲击载荷作用下铜粉末的力学行为，分析冲击波的传播特性，观察变形及速度分布特征，表征冲击速度与冲击波速度的关系及波后动态应力-应变状态。

1　数值模拟

1.1　几何模型

模型简化为二维等径圆形颗粒，颗粒直径为 30 μm，初始颗粒堆积方式大致分为 4 类：随机堆积、简单立方堆积、密排六方堆积和蜂窝堆积[22–24]。其中密排六方堆积及随机堆积的准静态压缩测试结果表明，压力-平均相对密度关系的变化趋势与实验结果吻合较好，随机堆积可以较好地描述颗粒间的摩擦作用机制。为此，采用随机堆积的建模方式，颗粒在空间随机分布，颗粒之间不重叠。

采用 Matlab 软件编写颗粒堆积模型，建立细观分布模型的步骤为：(1)计算出在一定空间内设定孔隙率ϕ(孔隙部分所占比重)下等径颗粒的个数，如表 1 所示；(2)随机撒点的坐标作为颗粒核点的初始位置，通过调整核点位置确保任意两点之间的距离大于或等于 2 倍颗粒半径；(3)实时更新颗粒位置坐标，直到所有颗粒都不重叠为止。例如图 1 颗粒材料生成试件的孔隙率分别为 0.50、0.35、0.25。

表 1　不同孔隙率下细观模型所含颗粒数

Table 1　Particle numbers of mesoscale model at different porosities

Porosity (ϕ)	Number of particles (N)
0.60	142
0.50	177
0.45	195
0.40	213
0.35	230
0.30	248
0.28	255
0.25	265

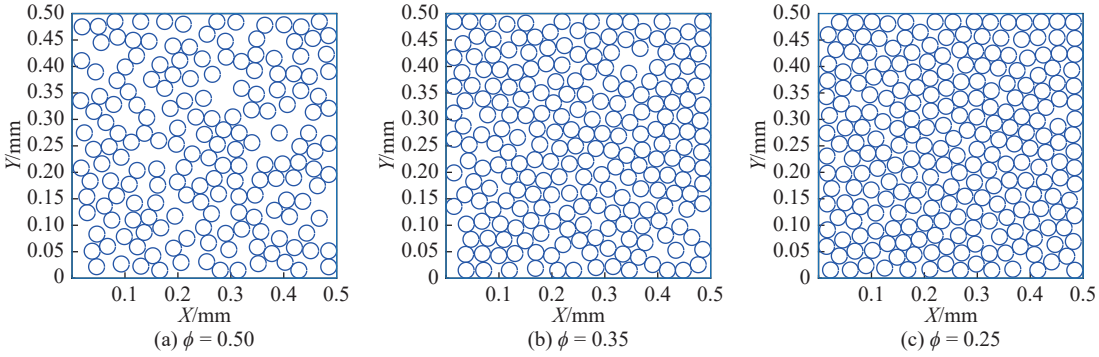


图 1　颗粒金属材料的几何模型

Fig. 1　Geometric models of granular materials

1.2　细观有限元模型

数值模拟采用 ABAQUS/Explicit 6.11，基体材料选择实验数据丰富的铜颗粒。对每个颗粒单独划分网格后导入有限元软件，颗粒网格划分如图 2(b) 所示，边界处网格进行加密处理，保证内部颗粒相互接触作用的精度，内部采用粗网格能有效提高计算效率，以节约计算时间。经过网格收敛性分析，每个颗粒划分成 100 个六面体单元，包含 226 个节点，采用体单元可以增加计算精度，但需约束节点在厚度方向的位移，限制粒子在二维平面内的变形。

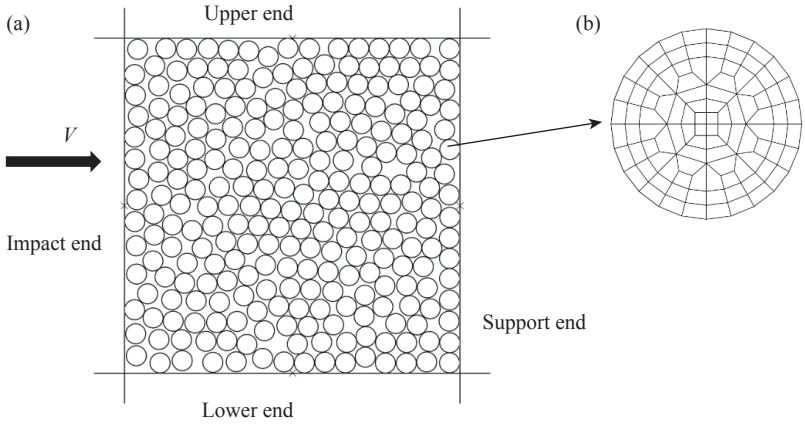


图 2　铜粉末恒速压缩的细观有限元模型 (a) 以及颗粒初始网格划分 (b)

Fig. 2　A finite element model of copper powders under constant-velocity compression (a) and the initial mesh of a particle (b)

铜粉末在高速冲击加载时表现出应变率硬化、应变硬化、温度软化等特性, 在此采用典型的应变率、温度相关的 Johnson-Cook 模型表征[25], 写作

$$\sigma = (\sigma_0 + B\varepsilon^n)\left(1 + C\ln\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}\right)\left[1 - \left(\frac{T - T_\mathrm{r}}{T_\mathrm{m} - T_\mathrm{r}}\right)^m\right] \tag{1}$$

式中: 屈服应力σ_0 为 90 MPa, 应变硬化系数 n 为 0.31, 材料参数 B 为 292 MPa, C 为 0.025, 参考应变率 $\dot{\varepsilon}_0$取为 1 s^{-1}, 熔点温度 T_m 为 1360 K, 参考温度 T_r 为 300 K, 温度软化系数 m 为 1.09。

本研究采用的基体材料模型可以较好地表征真实铜粉末在冲击加载时的温度响应特征, 粉末在压缩变形后, 部分塑性功转化为热能, 转化系数为 0.9, 从而带来温度升高的现象[26]。

颗粒试件位于长和宽均为 0.5 mm 的正方形容器内, 上端、下端及支撑端刚性板均固定不动, 冲击端刚性板以速度 V 向右恒速压缩, 如图 2(a) 所示。颗粒之间的摩擦系数设为 0.2, 颗粒与刚性板无摩擦[15]。颗粒之间的所有接触面定义为通用接触。法向接触属性采用硬接触, 切向选用罚函数接触。

2　数值结果

2.1　变形特征

通过对初始孔隙率为 0.28 的样本进行冲击压缩模拟, 观察发现在动态冲击下, 颗粒金属材料呈现出高度局部化的变形特征。随着冲击速度的提高, 变形局部化的特征更加明显, 波阵面变得更加平整, 波阵面后方的颗粒也随着冲击速度的增大而变形更加急剧, 由均匀变形渐渐转变为不均匀变形。应力波沿加载方向以近似平面的形式逐层传播, 波阵面宽度大约为 2～4 个颗粒直径。当冲击速度为 95 m/s 时, 波阵面后方还未完全压实, 仍存在一些孔隙, 孔隙率的减小依赖于颗粒的平动、转动和塑性变形。当速度增加到一定值时, 波后几乎完全压实, 没有孔隙, 此时波后应变为最大压实应变, 如图 3 所示。

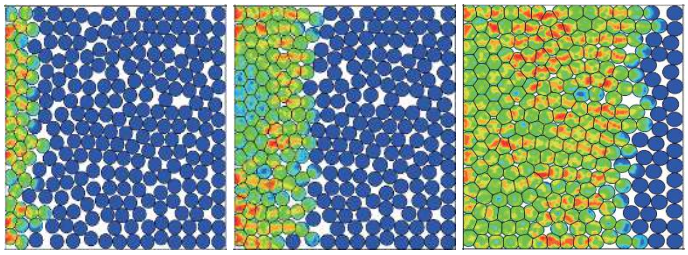
2.2　一维速度场分布

单轴冲击压缩下, 应力波以近似一维应变平面波的形式从冲击端向支撑端传播, 因此颗粒材料的冲击压缩问题可以简化为一维问题进行分析。引入一维速度场分布定量化地表征冲击波的传播特征。从有限元结果可以直接得到在 Lagrange 坐标系下每个节点的速度信息, 将各截面上的节点在加载方向的速度分量进行平均, 得到铜粉末在不同时刻 t 的一维速度场分布。速度场结果很好地捕捉到高速冲击下铜粉末呈冲击波模式的变形特征, 表明速度急剧变化集中在一条狭窄的区域内。冲击速度越高, 此区域越窄; 而冲击速度较低时, 波阵面越宽, 如图 4 所示。

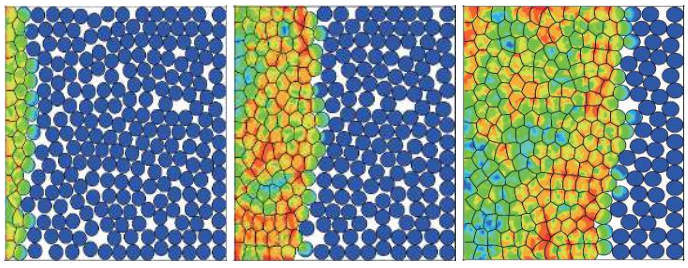
2.3　冲击波速度

塑性冲击波波阵面的位置可由局部应变率最大值的位置确定。基于一维应力波理论, 连续性方程为

$$\partial v/\partial X = \partial\varepsilon/\partial t \tag{2}$$



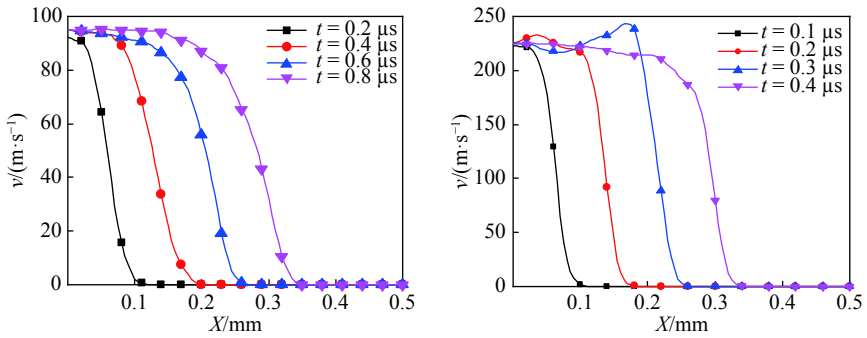
(a) V = 95 m/s



(b) V = 225 m/s

图 3　不同时刻试件变形图

Fig. 3　Deformation patterns at different times



(a) V = 95 m/s, ϕ = 0.28　　(b) V = 225 m/s, ϕ = 0.28

图 4　不同冲击速度下试件内的一维速度 (v) 分布

Fig. 4　One-dimensional velocity distribution in specimens under different impact velocities

可知速度梯度与应变率相等。一维速度场分布特征表明，高速冲击时，铜粉末的速度分布可以分为 3 个区域：波前的未变形区域、波后的压实区和状态发生突变的区域。依据速度梯度的变化趋势可以看出速度的变化程度，速度梯度最大处，速度变化程度最剧烈，将该位置作为此时刻冲击波波阵面的位置，如图 5 所示。

不同时刻的波阵面位置与时间近似呈线性关系，此直线的斜率即为冲击波波速。冲击速度越高，斜率越大，冲击波波速越大，如图 6 所示。

2.4　与实验结果的比较

将多颗粒细观有限元模拟所得结果与文献中气枪冲击实验结果[27] 及欧拉有限元数值模拟

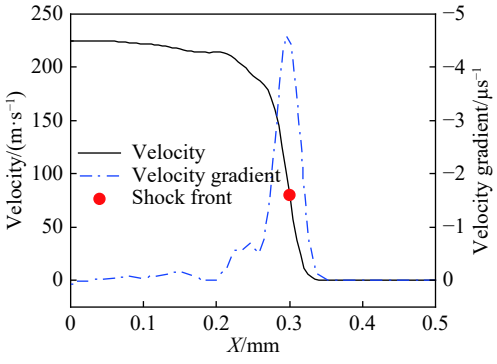


图 5　一维速度分布及其速度梯度 (V=225 m/s, t=0.4 μs, ϕ=0.28)

Fig. 5　One-dimensional velocity distribution and the corresponding velocity gradient (V=225 m/s, t=0.4 μs, ϕ=0.28)

结果[28]进行比较, 如图 7 所示。Benson[28] 所采用的欧拉有限元方法适用于速度更高的情形, 而在较低的冲击速度下, 该方法对波阵面位置的捕捉不准确, 导致冲击波波速的结果偏高。而采用多颗粒有限元方法所得结果与实验结果吻合较好, 二维简化模型所得冲击波波速略低于实验结果。Borg 等[29] 通过对陶瓷颗粒进行二维简化, 数值模拟分析其冲击 Hugoniot 关系, 所得结果类似。原因是相同孔隙率下, 二维模型的堆积配位数比三维少, 较真实粉末有更多的自由空间, 粒子连接链较短, 在一定程度上妨碍冲击波的传播, 从而导致冲击波波速较实验结果偏低。此外, 在较低的冲击速度下, 颗粒材料存在孔隙和分布不均匀性, 波阵面不平整, 选取波阵面位置和计算波速时会带来一定的误差。随着冲击速度的增大, 波阵面越来越狭窄, 位置较易确定, 波速计算精度提高, 误差逐渐减小。

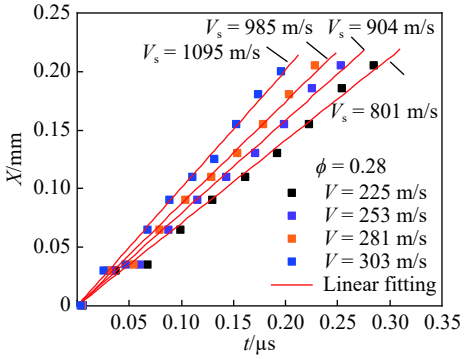


图 6　不同冲击速度下冲击波位置随时间变化的关系

Fig. 6　Variation of the shock front position with impact time at different impact velocities

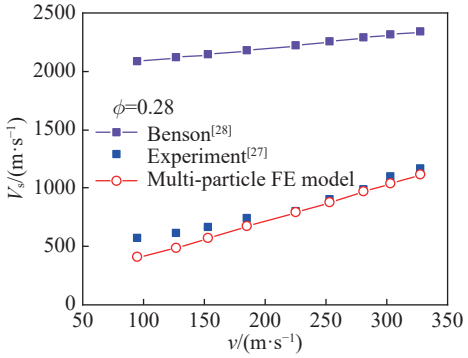


图 7　冲击波速度-粒子速度关系与已有文献结果对比

Fig. 7　Comparison of the shock wave speed-particle velocity relations with the data in the literature

3　理论分析

3.1　塑性冲击波模型

由第 2 节可知, 在较高速度冲击下, 应力波在颗粒试件中近似以塑性冲击波的形式沿加载方向逐层传播, 基于应力波理论[30] 分析, 冲击波波阵面上的质量守恒和动量守恒方程分别为

$$v_B - v_A = -V_s(\varepsilon_B - \varepsilon_A) \tag{3}$$

$$\sigma_B - \sigma_A = -\rho_0 V_s(v_B - v_A) \tag{4}$$

式中: V_s 为冲击波速度, $\{v_A, \varepsilon_A, \sigma_A\}$、$\{v_B, \varepsilon_B, \sigma_B\}$分别为波阵面前后的速度、应变、应力状态。

波前颗粒材料由于处于较疏松的状态, 颗粒间存在间隙, 弹性波不能向前传播, 因此应力、应变、速度都假设为零, 即波前状态为 v_A=0、ε_A=0、σ_A=0, 与冲击速度无关。

在动态冲击载荷作用下, 波后应变与冲击速度是有关的, 会随着冲击速度的增大而逐渐增大, 直到达到理论上的最大压实应变。当冲击速度增大到一定程度时, 波后应变逐渐逼近理论上能达到的最大压实应变, 写作

$$\varepsilon_B = \varepsilon_m \tag{5}$$

式中: ε_m=ϕ, 为最大压实应变。

恒速加载时波后速度为 v_B=V, 因此可求得冲击波波速

$$V_s = V/\phi \tag{6}$$

将(6)式代入(4)式可得波后应力

$$\sigma_B = -\rho_0 V^2/\phi \tag{7}$$

观察发现, 在速度较高时波前状态为 v_A=0、ε_A=0、σ_A=0, 波后状态为 v_B=V、ε_B=ϕ、σ_B=$-\rho_0 V^2/\phi$, 仅含有一个材料参数初始孔隙率ϕ。基于此特征, 发展以动态锁定应变为唯一参数的冲击波模型, 如图 8

所示。图 8 中箭头表示从波前状态沿 Rayleigh 线突跃到波后状态。该模型未考虑材料的率敏感性和温度的影响，仅以初始孔隙率ϕ表征较高冲击速度下铜粉末的动态应力-应变关系。

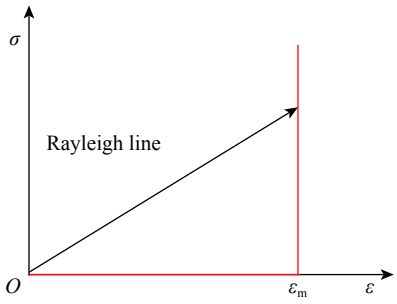


图 8　动态应变锁定冲击波模型

Fig. 8　Dynamic shock model with strain locked

3.2　理论模型的应用

通过已有文献实验结果验证了多颗粒有限元方法数值模拟的有效性，继续通过此方法计算不同孔隙率的铜粉末在不同冲击速度下粒子速度与冲击波速的关系。孔隙率分别为 0.25、0.28、0.30、0.35、0.40、0.45、0.50、0.60 的 V_s-v 关系，如图 9 所示。而通过动态应变锁定的冲击波模型得出的 V_s-v 关系与细观有限元模拟结果吻合极好，由此证明动态应变锁定的冲击波模型可以很好地表征不同孔隙率铜粉末的 Hugoniot 关系。

不同冲击速度下，冲击载荷不同；冲击速度越大，冲击端应力越大。高速恒速加载情形下，冲击端应力近似等于波后应力，由细观有限元模拟提取出的冲击端应力如图 10 所示。颗粒材料的不均匀性以及孔隙的存在导致冲击力振荡较大，但基本维持在某一特定值上下。由动态应变锁定的冲击波模型计算得出的波后应力可以很好地捕捉到这一水平。

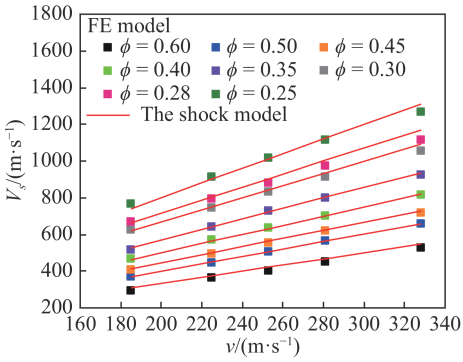


图 9　不同孔隙率的铜粉末粒子速度与冲击波速度的关系

Fig. 9　Variation of the shock wave speed with the particle velocity at different porosity of copper powders

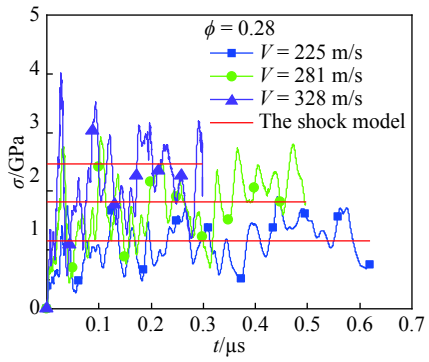


图 10　不同冲击速度下冲击端应力与冲击波模型所得波后应力比较

Fig. 10　Comparison of the stress at the impact end obtained from finite element models and the stress behind the shock wave front predicted by the shock model at different impact velocities

对于不同孔隙率的颗粒材料，波后应力随着孔隙率的增大逐渐减小，在某一恒定速度加载情形下，对塑性冲击波传到支撑端前这一时间范围内的冲击端应力进行平均，将所得应力与通过理论模型计算得出的波后应力进行比较。结果表明，冲击端平均应力与冲击波模型所得波后应力相对误差较小（小于 6%），如图 11 所示。相对误差由下式求得

$$\delta = \frac{\left|\sigma_{\mathrm{avg}} - \sigma_{\mathrm{s}}\right|}{\sigma_{\mathrm{avg}}} \times 100\% \tag{8}$$

式中：σ_{avg} 为冲击端平均应力，σ_{s} 为理论模型计算所得波后应力。

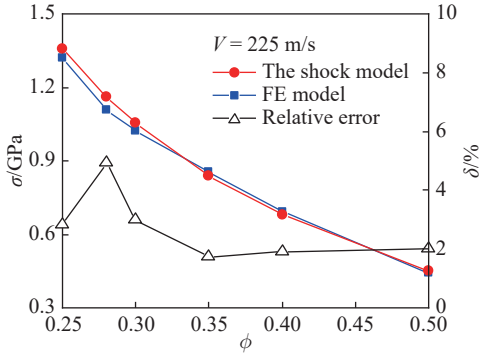


图 11　不同孔隙率下冲击端应力与冲击波模型所得波后应力比较

Fig. 11　Comparison of the stress at the impact end and the stress behind the shock wave front obtained by the shock model under different porosities

4 结　论

采用多颗粒有限元方法建立二维颗粒金属材料的冲击压缩模型。基于不同孔隙率下等径圆形颗粒的随机堆积模型，采用恒速压缩的加载方式，得到铜粉末的一维速度场分布，确定了塑性冲击波波阵面位置，进而得到了粒子速度与冲击波波速的关系。波后应变随着冲击速度增大，最终保持为最大压实应变不变，而波前应力、应变、速度均为零。基于颗粒材料的这一特征，发展了以动态锁定应变为唯一参数的冲击波模型，该模型可以很好地表征 V_s-v 关系并确定波后应力振荡的平均值。同时需要指出的是，该冲击波模型仅在速度较大、波后应变为最大压实应变时有较好的适用性，而在速度较小时会有较大的误差，在中低速下还需要发展更加精确的模型。颗粒金属材料的细观特性对其宏观力学性能有重要影响，本研究虽然从细观尺度建立模型，可以分析其宏观和微观力学响应，但是并未研究细观参数颗粒形状、尺寸、分布等的影响。基体材料选用的是 Johnson-Cook 模型，考虑了基体材料的应变率效应，但是在高速冲击加载时，应变率效应与惯性效应难以解耦，理论模型并未考虑应变率效应，即使这样仍可以较好地捕捉其主要特征。

参考文献:

[1] KELLY A, ZWEBEN C. Comprehensive composite materials [J]. Materials Today, 1999, 2(1): 20–21.

[2] CLYNE T W, WITHERS P J. An introduction to metal matrix composites [M]. New York, NY, USA: Cambridge University Press, 1993, 1(1): 155–164.

[3] KONDO K I, SOGA S, SAWAOKA A, et al. Shock compaction of silicon carbide powder [J]. Journal of Materials Science, 1985, 20(3): 1033–1048.

[4] MORRIS D G. Bonding processes during the dynamic compaction of metallic powders [J]. Materials Science & Engineering, 1983, 57(2): 187–195.

[5] SHAO B, LIU Z, ZHANG X. Explosive consolidation of amorphous cobalt-based alloys [J]. Journal of Materials Processing Technology, 1999, 85(1/2/3): 121–124.

[6] CARROLL M M, HOLT A C. Static and dynamic pore-collapse relations for ductile porous materials [J]. Journal of Applied Physics, 1972, 43(4): 1626–1636.

[7] BUTCHER B M, CARROLL M M, HOLT A C. Shock-wave compaction of porous aluminum [J]. Journal of Applied Physics, 1974, 45(9): 3864–3875.

[8] BOADE R R. Dynamic compression of porous tungsten [J]. Journal of Applied Physics, 1969, 40(9): 3781–3785.

[9] THADHANI N N, GRAHAM R A, ROYAL T, et al. Shock-induced chemical reactions in titanium-silicon powder mixtures of different morphologies: time-resolved pressure measurements and materials analysis [J]. Journal of Applied Physics, 1997, 82(3): 1113–1128.

[10] BOSLOUGH M B. A thermochemical model for shock-induced reactions (heat detonations) in solids [J]. Journal of Chemical Physics, 1990, 92(3): 1839–1848.

[11] NIEH T G, LUO P, NELLIS W, et al. Dynamic compaction of aluminum nanocrystals [J]. Acta Materialia, 1996, 44(9): 3781–3788.

[12] BENSON D J. An analysis by direct numerical simulation of the effects of particle morphology on the shock compaction of copper powder [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 1994, 2: 535–550.

[13] HORIE Y, YANO K. Nonequilibrium fluctutations in shock compression of polycrystalline α-Iron [C]//AIP Conference Proceedings, 2002:553–556.

[14] 潘昊, 王升涛, 吴子辉, 等. 孪晶对 Be 材料冲击加-卸载动力学影响的数值模拟研究 [J]. 物理学报, 2018, 67(16): 164601.
PAN H, WANG S T, WU Z H, et al. Effect of twining on dynamic behaviors of beryllium materials under impact loading and unloading [J]. Acta Physica Sinica, 2018, 67(16): 164601.

[15] HAN P, AN X, ZHANG Y, et al. Particulate scale MPFEM modeling on compaction of Fe and Al composite powders [J]. Powder Technology, 2016, 314: 69–77.

[16] HUANG F, AN X, ZHANG Y, et al. Multi-particle FEM simulation of 2D compaction on binary Al/SiC composite powders [J]. Powder Technology, 2017, 314: 39–48.

[17] ZHANG J. A study of compaction of composite particles by multi-particle finite element method [J]. Composites Science & Technology, 2009, 69(13): 2048–2053.

[18] HERRMANN W. Constitutive equation for the dynamic compaction of ductile porous materials [J]. Journal of Applied Physics,

1969, 40(6): 2490–2499.
[19] CARROLL M M, KIM K T, NESTERENKO V F. The effect of temperature on viscoplastic pore collapse [J]. Journal of Applied Physics, 1986, 59(6): 1962–1967.
[20] JOHNSON J N. Dynamic fracture and spallation in ductile solids [J]. Journal of Applied Physics, 1981, 52(4): 2812–2825.
[21] MOLINARI A, MERCIER S. Micromechanical modelling of porous materials under dynamic loading [J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 2001, 49(7): 1497–1516.
[22] ZAVALIANGOS A. A multiparticle simulation of powder compaction using finite element discretization of individual particles [J]. MRS Online Proceedings Library Archive, 2002: 731.
[23] ZHANG Y X, AN X Z, ZHANG Y L. Multi-particle FEM modeling on microscopic behavior of 2D particle compaction [J]. Applied Physics A, 2015, 118(3): 1015–1021.
[24] XIN X J, JAYARAMAN P, JIANG G, et al. Explicit finite element method simulation of consolidation of monolithic and composite powders [J]. Metallurgical & Materials Transactions A, 2002, 33(8): 2649–2658.
[25] JOHNSON G R, COOK W H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures [J]. Engineering Fracture Mechanics, 1985, 21(1): 31–48.
[26] ABAQUS. Abaqus 6.11 analysis user's manuals [M]. Rising Sun Mills, USA: Dassault Systmes, 2011.
[27] BOADE R R. Principal Hugoniot, second-shock Hugoniot, and release behavior of pressed copper powder [J]. Journal of Applied Physics, 1970, 41(11): 4542–4551.
[28] BENSON D J. The calculation of the shock velocity-particle velocity relationship for a copper powder by direct numerical simulation [J]. Wave Motion, 1995, 21(1): 85–99.
[29] BORG J P, VOGLER T J. Aspects of simulating the dynamic compaction of a granular ceramic [J]. Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering, 2009, 17(4): 045003.
[30] WANG L L. Foundations of stress waves [M]. Amsterdam: Elsevier Science Ltd., 2007.

Dynamic Compaction Behaviors of Copper Powders Using Multi-Particle Finite Element Method

PENG Kefeng[1], PAN Hao[2], ZHAO Kai[1], ZHENG Zhijun[1], YU Jilin[1]

(1. *CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials*, *Department of Modern Mechanics*, *University of Science and Technology of China*, *Hefei* 230026, *China*;
2. *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics*, *Beijing* 100088, *China*)

Abstract: The meso-scale characteristics of granular metal materials play an important role in macroscopic mechanical behavior. The dynamic compression behavior of metal powders still needs further researches. In this paper, the copper powders persisting rich experimental results were selected as the research objects. Based on the multi-particle finite element method, a two-dimensional numerical analysis model of granular metal materials was established, and the mechanical behavior of copper powders under impact compression was studied. The numerical results show that the granular metal materials exhibit a highly localized deformation band under high velocity impact, and the deformation bands propagate from the impact end to the support end like a shock wave. By using the velocity field calculation method, the position of the plastic impact wave front was calculated, and the Hugoniot relationship between the particle velocity and the shock wave velocity of copper powders with different porosities (0.25–0.60) was obtained. The numerical results agree well with the experimental results at high impact velocities (200–300 m/s). The shock wave model using the dynamic locking strain as the only parameter was developed. It is found that the Hugoniot relationship and the stress behind the shock wave front of the copper powders under high velocity impact are well characterized.

Keywords: granular metal materials; shock compression; multi-particle finite element method; shock model; Hugoniot relationship

DOI: 10.11858/gywlxb.20180608

金属内冲击波跨晶界传播的应力分配机制初探

王 轩, 黄生洪, 张永亮

(中国科学技术大学材料力学行为与设计重点实验室, 安徽 合肥 230026)

摘要: 冲击波跨越晶界过程中的应力分配机制对于深入理解冲击波与多晶金属材料的相互作用现象和塑性机理有重要意义。为探明该机制, 采用分子动力学, 对 4 种面心立方 (FCC) 晶格金属展开研究, 细致统计分析了冲击波在单晶金属{100}晶面内随晶向角变化的应力生成特征及冲击波跨过单一晶界前后的应力状态和大小关系。结果表明: (1) 垂直和平行于冲击波运动方向的应力分量随晶向角呈现不同的变化特征, 这种应力生成差异的根源来自晶格原子排列导致的受力差异和原子间作用力机制, 而其生成差异的结果恰恰是不同晶向塑性差异的主要原因; (2) 弹性冲击波跨过单一晶界前后的应力状态存在一定的分配转换关系, 由一个独立的应力分配张量 ***D*** 确定, 不同 FCC 晶格元素的 ***D*** 张量形式一致, 系数差异小, 具有一定的通用特征; (3) 验证表明, 对于给定的 FCC 晶格金属, ***D*** 具有一致的可预测特性, 反映了冲击波与晶格相互作用的本质特征。

关键词: 多晶金属; 冲击波; 晶界; 面心立方; 应力; 分子动力学

中图分类号: O369 **文献标识码:** A

自然界中绝大部分金属材料都是以多晶状态存在的。由于晶向排列的不同, 材料属性在介观尺度范围内存在一定的各向异性。这种各向异性会导致冲击波在晶体内传播时发生一定的改变, 从而影响与材料的微观作用过程。同时, 由于晶界的存在, 冲击波在多晶界面传播时会进一步形成复杂的相互作用现象, 对多晶金属材料的强度和塑性机理产生重要影响。目前, 这方面的研究随着冲击动力学从宏观向微介观尺度深入拓展而逐渐展开: 如 Cao 等[1] 通过分子动力学方法研究了冲击波从不同晶向冲击压缩单晶铜过程中晶格方向对缺陷微观结构演化的影响。Bringa 等研究了面心立方晶格金属中冲击波传播的各向异性[2−3] 以及晶粒尺寸、冲击强度和时间对纳米多晶铜波阵面展宽的影响[4−6]。Neogi 等[7] 模拟分析了单晶铜受不同角度、不同强度冲击波冲击时的结构相变和晶格转变。Kadau 等[8] 利用大尺度分子模拟研究了多晶铁中的冲击波传播特征, 并与实验结果取得良好吻合。赵丰鹏[9] 研究了多孔纳米铜的冲击压缩和反射过程, 观察了冲击波的弹塑性双波结构和超越现象。马文等[10−15] 模拟了多种纳米多晶金属受冲击压缩时的波阵面结构、影响因素以及冲击波阵面与微观塑性变形或相变过程的对应关系。陈开果等[16] 研究了冲击波在纳米金属铜中的多波结构。邵建立等模拟了单晶铝[17] 和单晶铁[18−19] 受冲击的微观过程, 发现压缩过程分为弹性压缩、晶格软化、相变、超应力松弛和高压相弹性压缩 5 个阶段, 并粗略获得了不同晶向下冲击波速度与活塞速度对应的关系。何安民等[20] 对室温下单晶铜沿(001)和(111)方向冲击加载及卸载下的塑性行为进行了模拟。罗胜年等[21−27] 针对孔隙、晶界、加载方向对纳米金属冲击响应的影响做了系列研究。Arman 等[21] 研究了冲击波中的弹性-塑性过渡区和剪切强度与波结构的关系。宗洪祥等[22] 研究了冲击相变过程中单晶钛的各向异性。谢云等[23] 研究

* **收稿日期:** 2018-07-31; **修回日期:** 2018-09-28

基金项目: 国防基础科学挑战计划(TZ2016001); 国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院“NSAF”联合基金(U1530125)

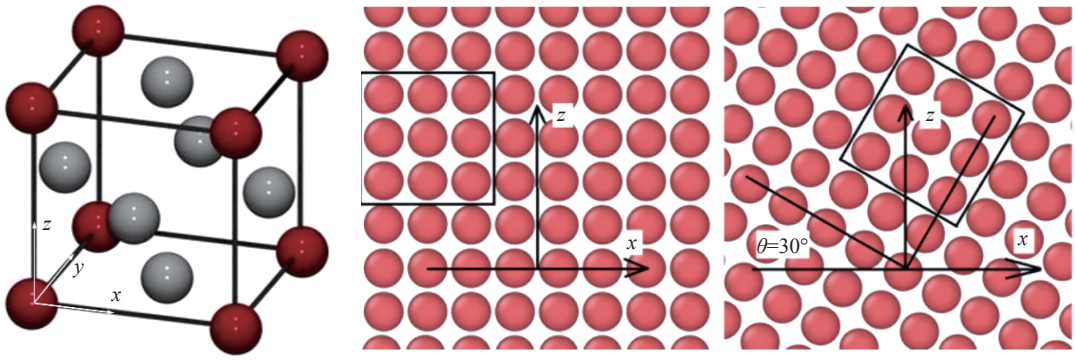
作者简介: 王 轩(1993—), 男, 硕士研究生, 主要研究冲击压缩微观物理. E-mail: swaggerw@mail.ustc.edu.cn

通信作者: 黄生洪(1974—), 男, 博士, 副教授, 主要从事冲击压缩动力学研究. E-mail: hshnpu@ustc.edu.cn

了单晶铜受冲击熔化的过程及临界速度。王亮[28]、Cao[29] 等分别研究了冲击过程中晶界对双晶钽和双晶铜变形的影响。Meyers 等[30] 研究了冲击加载下微米尺度多晶铁中的双波结构和冲击波阵面展宽的机理。Barber 等[31] 研究了不同金属材料的冲击波阵面展宽程度与冲击波速度等因素的关系。上述研究中，多数针对冲击波在单晶材料内的传播特性，如各向异性、波阵面结构以及弹塑性变形所对应的微观结构演化过程（位错的发射、演化和晶界的变形）等展开[32–40]，研究多集中于冲击波与单晶材料的相互作用、缺陷演化等唯象演化内容，而对冲击波在材料内的应力分配与晶格及晶向的关系、冲击波跨晶界的应力传播规律和分配机制等机理与模型研究较少，且尚无完整清晰的描述，特别是冲击波跨越晶界过程中应力如何传递和分配的机制等较少触及。显然，探索上述机理对更本质、更深入地理解多晶金属材料与冲击压缩的相互作用规律和塑性机理具有重要的参考价值。本研究采用分子动力学建模，以面心立方结构的金属为研究对象，对此展开初步研究。

1　冲击波在单晶金属{100}晶面内随晶向变化的应力生成特征

采用开源分子动力学模拟软件 LAMMPS[41] 研究冲击波与多晶金属材料的相互作用规律和应力分配特征。研究对象为面心立方 FCC(Face-Centered Cubic) 晶格结构的金属材料，如图 1(a) 所示。作为初步研究，只考虑在{100}晶面内晶向变化对应力波传播的影响，这样做的主要原因在于：直接三维晶向变化至少涉及两个独立晶向角变量，其应力变化关系必然非常复杂；而取一个平面内的晶向变化来研究，则独立变量只有一个晶向角，便于搞清楚平面内晶向角变化对应力波传播的影响机理。选取的{100}晶面是面心立方晶格面心原子排列所在平面，是面心立方晶格的代表性晶面。将面心立方晶格的晶面指数 (100)、(010)、(001) 方向分别与笛卡尔坐标轴 x、y、z 重合的晶格排列称为{100}晶面内的 0°晶向，晶格绕 y 轴按顺时针旋转θ角的晶格称为{100}晶面内的θ角度晶向 (图 1(b))，晶格的方向矢量为 (cos θ, 0, –sin θ)、(0,1,0)、(sin θ, 0, cos θ)。为叙述简便，除非特殊说明，晶向及其角度θ均指{100}晶面内的晶格排列及相对角度。



(a) FCC lattice　　(b) Lattice arrangement of orientation in xz plane: 0°, 30°

图 1　金属内的晶格和晶向排列示意图

Fig. 1　Crystal lattice and arrangement of metal

本节首先观察冲击波在不同晶向金属中传播的应力生成特征。计算模型如图 2 所示。水平方向为 x 轴，竖直方向为 z 轴，垂直纸面方向为 y 轴，为右手笛卡尔坐标系。模型区域为长方体，x、y、z 方向分别包含 200、20、200 个晶格，晶格材料为铜，计算域尺寸约为 723 Å×72.3 Å×723 Å（随晶格排列略有变化）。需要说明的是，由于晶向角变化是在同一晶面内，原子排列在垂直于 xz 平面内具有准二维特征，因此 y 向原子排列取了较少的晶格数（20），这样可以较大程度节省计算量，且验证表明这样对应力统计结果没有影响。晶格方向 0°～90°，$\Delta\theta = 15°$，共 7 个工况。x、y 方向为周期性边界，z 方向顶部为自由边界，z 方向底部为刚性反射壁。计算时，反射壁作为活塞从模型底部开始沿 z 轴正向以恒定速度 v_p 冲击压缩模型，产生冲击波并维持冲击速度 v_p。

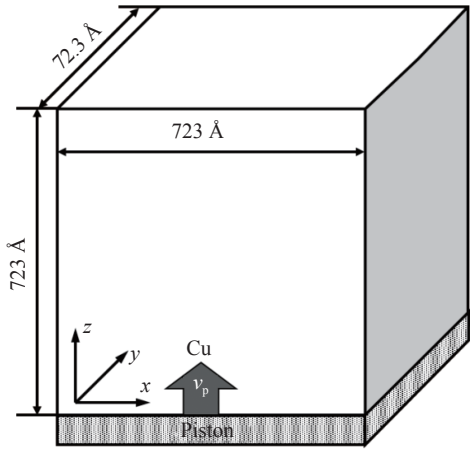


图 2　冲击波在单晶金属中传播的计算模型

Fig. 2　Computational model of shock-wave propagation in metal single crystal

原子间作用势函数采用 EAM 多体势函数，势函数值根据 Zhou 等[42] 提出的势函数模型及给出的参数数据得到（该参数数据已被众多计算验证，本研究不再作专门验证）。冲击加载之前先进行弛豫，使系统达到平衡状态，设置初始温度为 300 K，无预压应力条件，时间步长 0.01 ps，运行 10 000 个时间步，弛豫总时长为 100 ps。冲击加载时的时间步长为 0.005 ps，运行 3000 个时间步，总时长 15 ps。冲击速度 v_p 范围为 0.5～5.0 km/s。

为了评价冲击波后的应力生成特征以及跨晶界的应力分配机制，利用 LAMMPS[41] 提供的应力计算方法进行后处理计算。首先，利用 Compute Stress/Atom 命令[43] 可以计算每个原子的对称应力张量，该张量包含 6 个独立分量，按照顺序依次为 xx、yy、zz、xy、xz、yz。原子 i 的应力张量为

$$S_{ab}=-\left[mv_a v_b+\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N_p}(r_{1a}F_{1b}+r_{2a}F_{2b})+\cdots\right] \tag{1}$$

式中：a、b 在 x、y、z 中取值以计算应力张量的每个分量。第一项是动能项，用于计算原子 i 的动能；第二项是原子 i 与周围 N_p 个原子的成对能量（Pairwise Energy），r_1 和 r_2 分别是成对相互作用中两个原子的位置，F_1 和 F_2 分别是由成对相互作用产生的两个原子上受到的力。该式中还包含其他项，但是由于本计算中并没有涉及到，因此这里未列出。

(1) 式定义的是一个压力×体积公式，意味着计算结果是以压力×体积为单位。因此需要将计算结果除以每个原子的体积以获得每个原子的应力值，但是单个原子的体积没有很好地定义并且难以在固体中进行计算。更重要的是应力是宏观量，求出单个原子应力的意义不大。因此需将计算模型划分成许多个尺寸相等的小单元，每个单元中有多个原子，将单元视为整体，单个原子体积的计算转化为计算单元体积，叠加单元内所有原子的利用 (1) 式计算出的结果再除以单元体积，就可以获得单元的应力张量。LAMMPS 中提供了 Compute Chunk/Atom 和 Fix Ave/Chunk 命令[43]，可以很方便地对模型划分单元和在单元内进行统计并输出到文件。

计算的应力单元网格划分见图 3。划分网格时在 x、y、z 方向采用三维网格划分。x、y、z 方向网格尺寸如图 3 所示均为 10 Å，因此每个单元的体积为 10 Å×10 Å×10 Å。由于 y 向应力基本均匀，后面等值图中显示均为中心平面上统计的应力分布，因此在提取应力张量值时，为了减小统计随原子数目的涨落，还需要对每个单元的应力张量与邻域单元进行平均，最后取平均值。

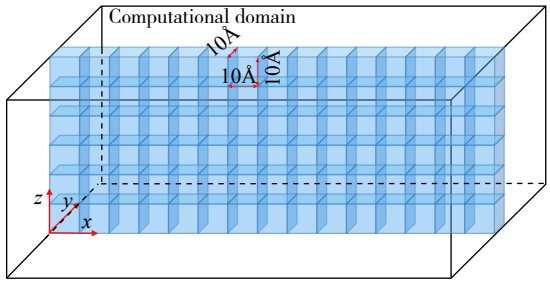


图 3　应力统计的单元网格划分示意图

Fig. 3　Grid configuration for stress tensor calculation

图 4 显示了活塞以速度 v_p= 1 km/s 冲击不同晶向单晶铜模型过程中 t = 10 ps 时的晶格排列（色彩表示不同的晶格形式）以及冲击波区域的应力张量主分量分布，从左往右晶向角度θ从 0°到 90°顺序变化，晶向角间隔$\Delta\theta$ = 15°。其中的红色线表示冲击波的最前端位置。

可以看出，各种工况下，冲击波后方区域可以明显分为两个部分：（1）弹性变形区，波前和波后晶格

未变(FCC)或发生少量变化(存在少量混合型晶格),绝大部分晶格仅发生弹性可恢复的变形;(2)塑性变形区域,产生大量位错,且大部分晶格开始发生变化,如转化成体心立方晶格(BCC)或密排六方晶格(HCP)。

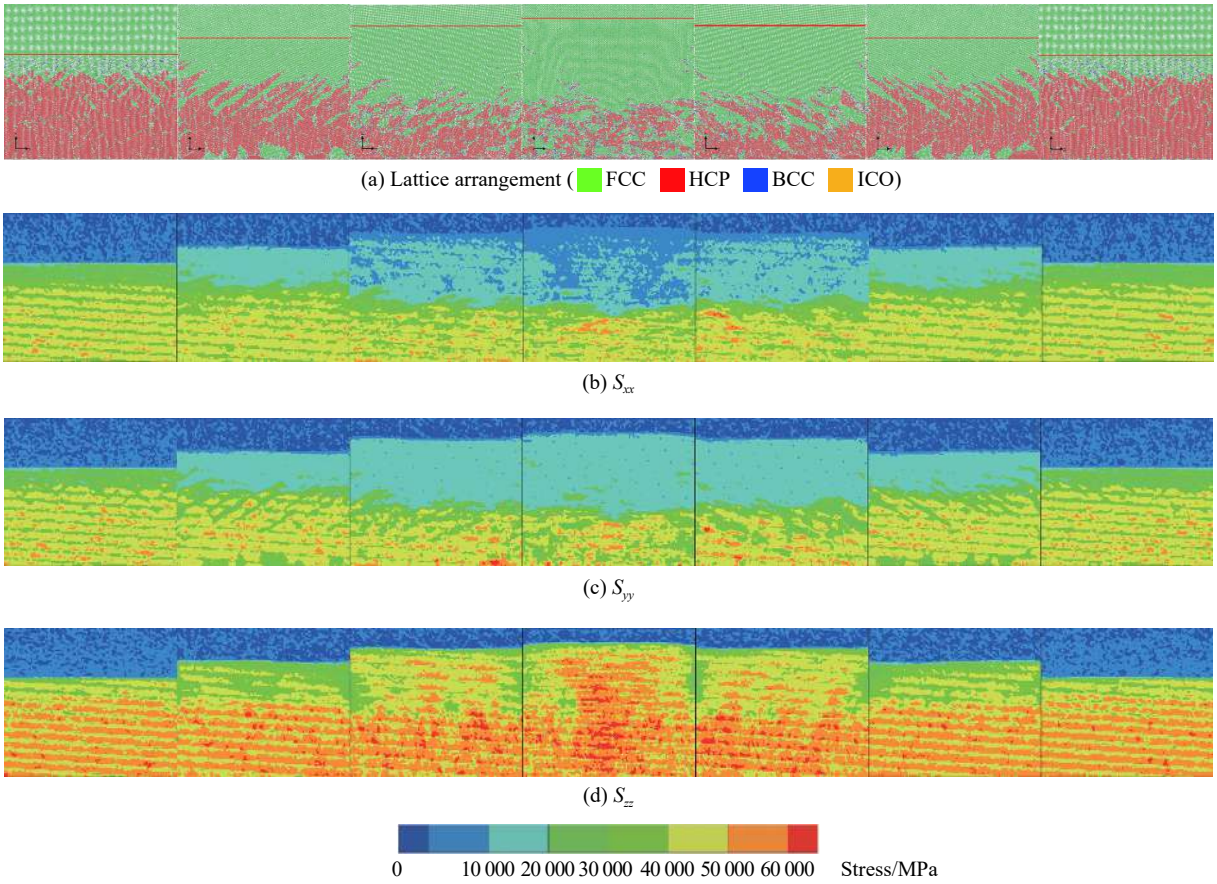


图 4　v_p= 1 km/s 冲击下 t=10 ps 时不同晶向单晶铜的原子排列(色彩表示不同的晶格形式)以及应力张量分量(S_{xx}, S_{yy}, S_{zz})分布差异(从左往右晶格角度θ从 0°到 90°, $\Delta\theta$ = 15°)

Fig. 4　Snapshot of lattice arrangement and stress tensor components (S_{xx}, S_{yy}, S_{zz}) of monocrystal copper at t = 10 ps under impact of v_p = 1 km/s(Lattice arrangement orientation θ = 0° –90°, $\Delta\theta$ = 15°)

从图 4 得到以下结论。

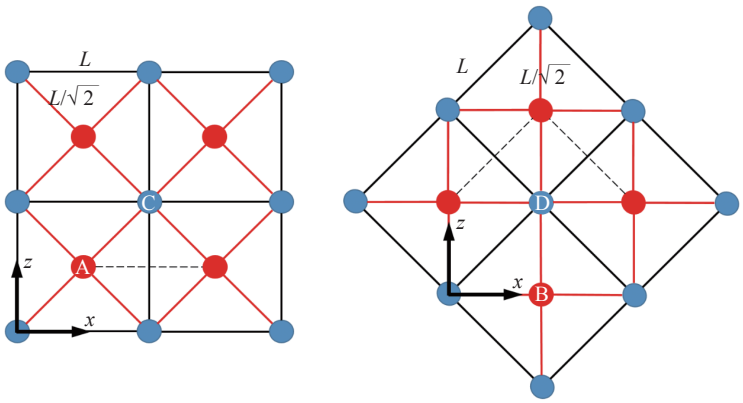
(1)在相同的活塞冲击速度下,不同晶向的单晶铜材料内产生的冲击波速度 v_s 存在差异:即随着晶向角的增加,冲击波波速加快,当θ = 45°时达到最大值,并以 45°晶向工况为中心呈对称分布。这反映了冲击波沿不同晶向传播的各向异性,与 Bringa 等[2–3] 得到的结果一致。

(2)随着冲击波速度的增加,相同时间内冲击波传播经过的区域总面积增加,但主要是弹性变形区的面积增加,而塑性变形区的面积却在缩小。这说明冲击波在当前的状态下分成了两个部分,即传播速度较快,晶格未发生变化的弹性应力波和传播速度较慢,产生大量位错及晶格变化的塑性应力波。塑性应力波传播速度变化规律显然与弹性应力波变化规律相反,即随着晶向角的增加而有所降低,在 45°晶向角时降至最低,整个冲击波波阵面形成明显的双波结构。

(3)从应力统计结果来看,冲击波波后应力张量分量随晶向角度呈一定规律变化。如 x、y 方向主应力分量 S_{xx}、S_{yy} 在弹性应力波区从晶向角θ=0°开始随θ的增加逐渐减小,其中 S_{xx} 幅值减小较快,当θ = 45°时达到最小值,并以 45°工况为中心呈对称分布;而 z 方向主应力分量 S_{zz} 则在弹性应力波区从晶向角 θ=0°开始随θ的增加而逐渐增大,当θ = 45°时达到最大值,并以 45°工况为中心呈对称分布。在塑性应力波区,主应力分量 S_{xx}、S_{yy}、S_{zz} 基本不随晶向角变化,S_{zz} 保持较大的分量值。这与塑性波区晶格的

转化(FCC→HCP)和大量位错形成有关。可见, 与冲击波结构的演化一致, 应力张量的各向异性分配主要在弹性应力波区。

为了进一步解释上述应力分配差异, 图 5 给出了 xz 平面内$\theta = 0°$和$\theta = 45°$时 FCC 晶格原子排列示意图。由图 5 可见, 在 xz 平面内, $\theta = 0°$工况和$\theta = 45°$工况的原子排列有以下不同特征: $\theta = 0°$晶向下, x 和 z 向原子的排列间隔是 L; 而$\theta = 45°$晶向下, x 和 z 向原子的排列间隔是$L/\sqrt{2}$, 小于$\theta = 0°$晶向, 即$\theta = 45°$晶向下, 原子之间的 z 向距离小于 0°晶向。



(a) θ=0°　　(b) θ=45°

图 5　xz 平面内晶格原子排列与应力产生机制

Fig. 5　Lattice arrangement and stress generation mechanism

进一步分析可以得到以下结论。

(1)$\theta = 0°$晶向下, z 方向发生压缩变形, 主要是蓝色原子间 z 向距离发生改变, 产生 z 向作用力, 形成 z 向应力。而蓝色原子 x 向距离未变, 故对 x 向不直接产生作用力。但是, 蓝色原子与红色原子间距离改变, 因此将对红色原子产生挤压作用, 形成 x 向应力(同时也有部分分解到 z 向增加 z 向应力)。故在 0°晶向下, 蓝色原子和红色原子主要负责产生 S_{zz}, 而红色原子主要负责产生 S_{xx}。同理分析, $\theta = 45°$晶向下, 红色和蓝色原子共同负责产生 S_{zz}, 而蓝色原子负责产生 S_{xx}。

(2)比较 0°晶向下产生 S_{zz} 和 S_{xx} 的原子构成和作用距离来看, 产生 S_{zz} 的包含两对蓝色原子和 4 对蓝色/红色原子作用力在 z 向分量, 而产生 S_{xx} 的只包含 4 对蓝色/红色原子作用力在 x 向分量, 显然 z 方向的作用力分量和值要大于 x 向, 这解释了图 4 中冲击波后弹性波区应力 S_{zz}>S_{xx} 的现象。

(3)45°晶向下, 直接产生 S_{zz} 的红色和蓝色原子间的直接作用距离均为$L/\sqrt{2}$, 而直接产生 S_{xx} 的蓝色原子间的直接作用距离增加为 L。由于原子间作用力随原子间距离的减小而增大, 从而解释了相同 z 向压缩程度下, 随着晶向角从 0°转到 45°, 弹性波区 S_{zz} 进一步增加而 S_{xx} 减小的现象。同理, 可以在 zy 平面内解释 S_{yy} 减小的现象。

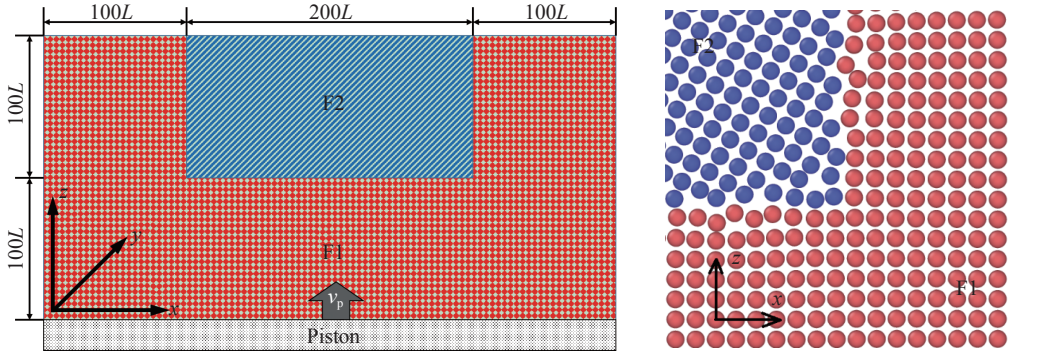
(4)由于 0°晶向和 45°晶向晶格原子在 zx、zy 平面内排列的对称性, 这两种角度下的 z 向压缩, 显然不会产生切向应变, 即对应的 S_{zx} 和 S_{zy} 接近零。而 0°晶向和 45°晶向之间必然存在一定的切应力, 不过幅值不大。

(5)进一步对比 0°晶向和 45°晶向塑性变形区大小, 显然 45°晶向塑性变形区明显减弱, 而二者主要的差异在于 S_{xx}(S_{yy})的减小和 S_{zz} 的增大。可见, 正是 S_{xx}(S_{yy})的减小对于塑性变形区的减小起主导作用。联系晶格的原子排列来看, 其机理在于 S_{xx}(S_{yy})的降低减少了面心原子(红色)失稳陷入体心形成新的晶格(BCC)的几率。而晶格的转化正是形成位错和滑移(塑性)的主要机制。也就是说, 晶格排列导致的应力产生差异是不同晶向塑性差异的主要原因。

(6)显而易见, 在上述机制下, 随着晶向角从 0°转到 45°, z 方向的弹性模量必然是增加的, 其声速必然增加, 这也解释了随着晶向角从 0°转到 45°, 弹性波速增加的原因。

2　冲击波在{100}晶面内跨单一晶界传播的应力分配特征

第 1 节讨论了 1 km/s 冲击速度下，冲击波在单晶铜内不同晶向条件下的应力生成特征。自然界多数材料以多晶形式存在，冲击波的作用必然跨越晶界。目前，关于冲击波跨过晶界在两种晶相中传播的特征和应力分配规律尚不清楚，本节将继续深入探讨。仍以铜 (Cu)FCC 晶格金属作为研究对象。计算模型如图 6(a) 所示，水平方向为 x 轴，垂直纸面方向为 y 轴，竖直方向为 z 轴，为右手笛卡尔坐标系；模型为长方体形状。x、y 方向设置为周期性边界，z 方向为自由边界。y 方向尺寸仍为 $20L$ (Lattice Constant)。模型分为两部分 F1 和 F2，两部分由相同的金属原子组成，仅晶格方向不同，形成单一晶界。与前一部分相同，本节晶向角仍指{100}晶面内晶向角。模型 F1 部分晶格角度$\theta = 0°$，F2 部分晶格角度θ从 5°到 85°，$\Delta\theta = 5°$，每次计算仅取一个角度。因此对于每种金属的模拟研究将包括 17 个工况。为了保持模型的一致性，不同工况具有相同的晶格数目，模型在 x、y、z 方向分别包括 400、20、200 个晶格，F2 部分因为晶格旋转，不同角度工况下晶格数目会略有差异。图 6(b) 是局部放大的原子排列示意图(图中蓝色部分$\theta = 30°$)，利用可视化软件 OVITO[44] 生成。需要说明的是，实际的晶界形状复杂，为了便于分析和计算，F2 部分取为矩形，即水平晶界与冲击方向垂直，垂直晶界与冲击方向平行，这并不影响计算结果的合理性和有效性。



(a) Computational model　　(b) Local lattice arrangement on grain boundary

图 6　跨晶界冲击计算模型示意图

Fig. 6　Computational model for shock across grain boundary

与第 1 节模型类似，刚性反射壁平面垂直于 z 轴，作为活塞从模型底部开始沿 z 轴正向以恒定速度 v_p 冲击压缩模型。其余计算设置与前一模型完全相同。

图 7(a) 展示了冲击波跨过晶界之前和之后应力统计的统计区域划分，红色实线表示晶界所在位置，水平的黑色虚线表示冲击波的最前端。冲击波跨过晶界之前，应力在区域 A5 内进行统计计算，A5 上边界与晶界距离 $L_2 > 50$ Å，尺寸为 1200 Å×30 Å，x 方向包含 120 个单元，总共包含 360 个单元。图 7(b) 展示了冲击波跨过晶界之后进行应力统计的统计区域划分，在黑色方框 A3 区域内进行应力统计计算。为了排除边界效应的影响，区域 A3 的左右边界与竖直晶界的距离在 100 Å左右，上边界与冲击波最前端一致。为保证跨越晶界后的应力统计不受晶界的影响，统计时需要区域 A3 的下边界与水平晶界保证一定距离($L_1 > 200$ Å)。区域 A3 的尺寸为 520 Å×30 Å，x 方向包含 52 个单元，z 方向包含 3 个单元，总共包含 156 个单元。

统计时，对区域内每行沿 x 方向进行平均(共 3 行)，输出每行的平均值；再选取冲击波传播过程的 3 个连续时刻结果进行统计平均。这样，每个应力分量得出 9 个统计值。

图 8 是统计获得的 v_p=1 km/s 冲击速度下，铜材料内冲击波跨过水平方向晶界之前 (末尾带 b 标记) 和之后 (末尾带 a 标记) 的应力张量分量随晶向角θ从 5°变化到 85°条件下各应力分量值的曲线图。通过分析可以得到如下结果。

(1) 冲击波在跨过水平方向晶界之前，z 方向(冲击波传播方向)正应力 $S_{zz\text{-b}}$ 最大且明显大于其他方

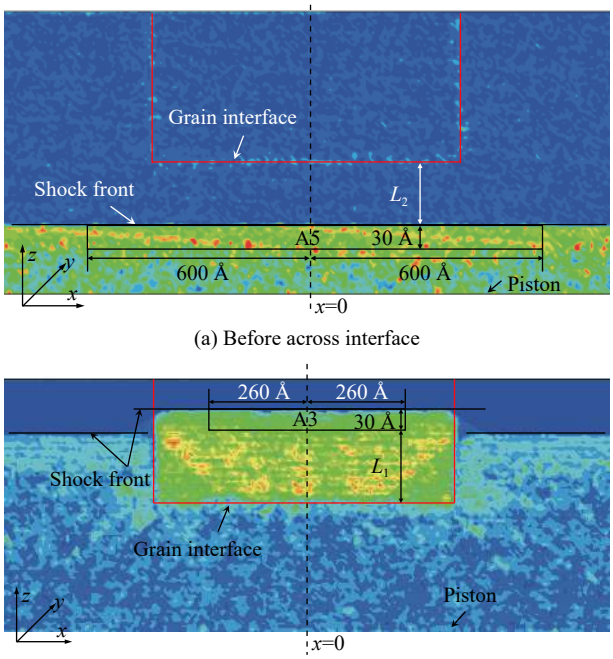
向的应力，x 方向正应力 $S_{xx\text{-b}}$ 和 y 方向正应力 $S_{yy\text{-b}}$ 相差无几，3 个正应力分别趋近于某一恒定值。切应力 $S_{xy\text{-b}}$、$S_{xz\text{-b}}$、$S_{yz\text{-b}}$ 远小于正应力，并且都趋于零。这与第 1 节对单晶铜的冲击结果一致。

(2) 冲击波跨过水平方向晶界之后，z 方向波后正应力 $S_{zz\text{-a}}$ 进一步增大，当晶向角度 θ 从 5°增加到 45°时，取得最大值；晶向角 θ 继续从 45°增加到 90°时，$S_{zz\text{-a}}$ 逐渐减小至约等于 $S_{zz\text{-b}}$。$S_{zz\text{-a}}$ 曲线以 $\theta=45°$ 线为对称面呈左右对称，整体呈现上凸的弧形。

(3) 冲击波跨过水平方向晶界之后，x 方向正应力 $S_{xx\text{-a}}$ 和 y 方向正应力 $S_{yy\text{-a}}$ 在大小上显示出差异，$S_{yy\text{-a}}$ 略大于 $S_{xx\text{-a}}$，其变化规律相同，且与 $S_{zz\text{-a}}$ 的变化规律相反。即当晶向角度 θ 从 5°增加到 45°时 $S_{xx\text{-a}}$ 和 $S_{yy\text{-a}}$ 逐渐减小，在 $\theta=45°$ 时取得最小值；同样以 $\theta=45°$ 线为对称面呈左右对称，但是整体呈现下凹的弧形。

(4) 冲击波跨过水平方向晶界之后，切应力 $S_{xy\text{-a}}$、$S_{yz\text{-a}}$ 与跨晶界前 $S_{xy\text{-b}}$、$S_{xz\text{-b}}$、$S_{yz\text{-b}}$ 类似，远小于正应力，都趋于零。而切应力 $S_{xz\text{-a}}$ 随 θ 增加从零开始迅速增大，在 $\theta\approx15°$ 处获得最大值；随后 $S_{xz\text{-a}}$ 逐渐减小，在 $\theta=45°$ 时再次趋近于零。而 $\theta>45°$ 后，$S_{xz\text{-a}}$ 反方向继续增大，在 $\theta\approx75°$ 处获得反向最大值(负值)；而 $\theta>75°$ 后又迅速增大至零。变化过程中应力减小速率略小于增大速率，$S_{xz\text{-a}}$ 在 $\theta\approx15°$ 和 $\theta\approx75°$ 处的绝对值相等。$S_{xz\text{-a}}$ 曲线形状类近似正弦曲线。

(5) 对比本次计算中统计到的铜应力张量随冲击波跨越晶界(0°晶向到其他晶向)的变化规律与直接对单晶按相同晶向角冲击后统计的应力分布，可以发现二者基本一致。这反映了冲击波在单晶中的传播特性是由晶格及其原子特性确定的，相近的冲击条件会得到一致的结果。不过，由于是同一个冲击波作用(由于传播尺度在晶格之间，可近似认为冲击波强度不随传播距离改变)，可以进一步分析应力波在跨越晶界前后的变化规律。



(a) Before across interface

(b) After across interface

图 7　跨晶界冲击计算应力统计区划分

Fig. 7　Stress calculation zone definition for shock across grain interface

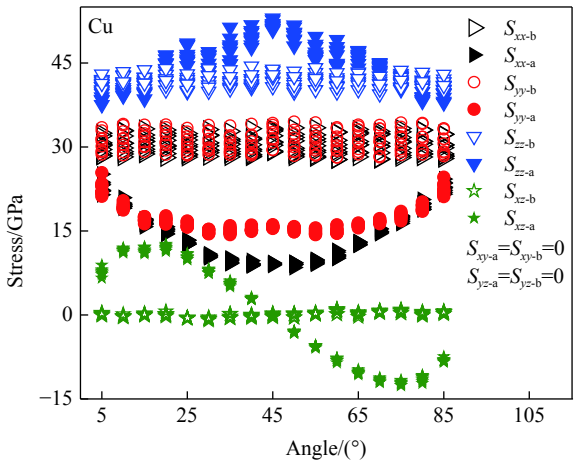


图 8　v_p=1 km/s 条件下冲击波跨铜晶界前后应力张量分量分布曲线

Fig. 8　Stress tensor components distribution of shock across Cu grain boundary at v_p=1 km/s

由于晶向变化对冲击波跨晶界的应力分配差异主要体现在弹性波范围内，因此首先对弹性波速范围内跨晶界的应力分量进行统计分析，观察是否存在定量的分配关系。设冲击波跨过晶界前的应力张量为 $\boldsymbol{\sigma}_b$，跨过晶界后的应力张量为 $\boldsymbol{\sigma}_a$，假设二者通过应力分配张量 $\boldsymbol{D}$ 进行转换，具体形式如 (2) 式所示。将应力张量各分量组成 3 乘 3 的矩阵进行计算，因此张量 $\boldsymbol{D}$ 的最终表示形式也是 3×3 的矩阵。

根据前文分析，冲击波跨过晶界之前是 0°晶向角，切应力分量近似为零，因此 $\boldsymbol{\sigma}_b$ 的矩阵形式为对角阵；对图 8 中主应力 $S_{xx\text{-b}}$、$S_{yy\text{-b}}$ 和 $S_{zz\text{-b}}$ 的数据进行线性平均，可求出对角元素值。对于同一种金属 0°晶

向角，$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{b}}$有且只有一个。

冲击波跨过晶界之后，切应力 $S_{xy\text{-a}}$、$S_{yz\text{-a}}$ 为零，$S_{xz\text{-a}}$ 不等于零，所以$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{a}}$的矩阵中有 4 个元素为零。不同晶向角度下的$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{a}}$都不一样，每种金属从 5°到 85°总共有 17 个张量矩阵。在各个角度下分别对应力分量的数据做平均，平均值作为$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{a}}$的矩阵元素值。(2) 式的矩阵表示形式如 (3) 式所示。

$$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{a}} = \boldsymbol{D}\cdot\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{b}} \tag{2}$$

$$\begin{bmatrix} S_{xx} & 0 & S_{xz} \\ 0 & S_{yy} & 0 \\ S_{zx} & 0 & S_{zz} \end{bmatrix}_{\mathrm{a}} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} S_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & S_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & S_{zz} \end{bmatrix}_{\mathrm{b}} \tag{3}$$

进行矩阵运算可将不同角度下的张量 $\boldsymbol{D}$ 逐一求出，每种金属可以求出对应的 17 个张量矩阵。此外，根据 FCC 的晶格特征，当晶向角度为 0°或者 90°时，F1 和 F2 区域之间晶向相同，因此有$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{a}} = \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{b}}$，此时 $\boldsymbol{D}$ 的矩阵应为对角元素为 1 的单位矩阵，即张量 $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{G}$（度量张量）。

对铜材料跨晶界冲击模拟中弹性波速范围内的应力分配张量 $\boldsymbol{D}$ 进行计算，获得各个分量随晶向角变化的结果，如图 9 所示。通过对图 9 进行分析和观察，发现张量 $\boldsymbol{D}$ 分量曲线近似正弦曲线，可以通过拟合找出 $\boldsymbol{D}$ 张量分量与跨晶界晶向角的关系，拟合函数为

$$y = y_0 + A\sin\left(\frac{2\pi}{T}\theta\right) \tag{4}$$

式中：A、y_0 为常数系数，参数 T 可以调节变化周期 (°)，θ代表晶向角度 (°)，π为圆周率，y 代表拟合函数值。根据观察，拟合时选取了正应力分量的周期 T=180°，切应力分量的周期 T=90°。拟合后各工况的张量 $\boldsymbol{D}$ 为

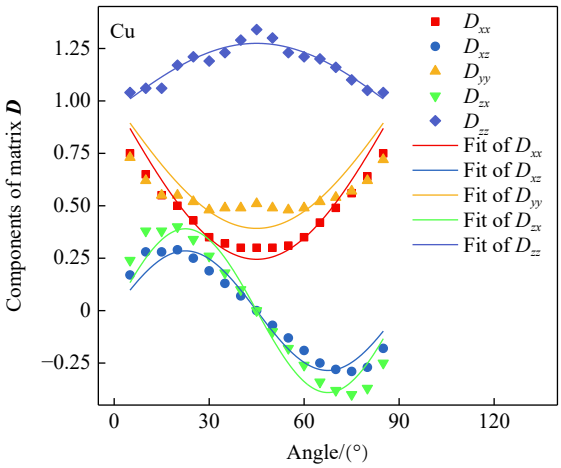


图 9　铜跨晶界冲击中应力分配张量 D 分量分布及其拟合曲线

Fig. 9　Stress transformation tensor D components distribution curves (calculated and fitted) for shock across grain boundary simulations of Cu

$$[\boldsymbol{D}]_{\mathrm{Cu}} = \begin{bmatrix} 1-0.75\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) & 0 & 0.28\sin\left(\frac{\pi}{45}\theta\right) \\ 0 & 1-0.61\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) & 0 \\ 0.39\sin\left(\frac{\pi}{45}\theta\right) & 0 & 1+0.13\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) \end{bmatrix} \tag{5}$$

为验证张量 $\boldsymbol{D}$ 具有通用性，本研究还在相似条件下对其他 FCC 金属材料（如银、镍、钛）进行了计算，均获得了相似的张量形式

$$[\boldsymbol{D}]_{\mathrm{Ni}} = \begin{bmatrix} 1-0.77\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) & 0 & 0.30\sin\left(\frac{\pi}{45}\theta\right) \\ 0 & 1-0.56\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) & 0 \\ 0.39\sin\left(\frac{\pi}{45}\theta\right) & 0 & 1+0.10\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$[\boldsymbol{D}]_{\mathrm{Ag}} = \begin{bmatrix} 1-0.65\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) & 0 & 0.27\sin\left(\frac{\pi}{45}\theta\right) \\ 0 & 1-0.32\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) & 0 \\ 0.38\sin\left(\frac{\pi}{45}\theta\right) & 0 & 1+0.18\sin\left(\frac{\pi}{90}\theta\right) \end{bmatrix} \tag{7}$$

$$[\boldsymbol{D}]_{\mathrm{Ti}}=\begin{bmatrix} 1-0.68\sin\left(\dfrac{\pi}{90}\theta\right) & 0 & 0.31\sin\left(\dfrac{\pi}{45}\theta\right) \\ 0 & 1-0.33\sin\left(\dfrac{\pi}{90}\theta\right) & 0 \\ 0.39\sin\left(\dfrac{\pi}{45}\theta\right) & 0 & 1+0.22\sin\left(\dfrac{\pi}{90}\theta\right) \end{bmatrix} \tag{8}$$

可见, 4 种元素获得的 $\boldsymbol{D}$ 张量形式一致, 且系数差异亦很小, 这说明 $\boldsymbol{D}$ 张量具有通用性, 通式为

$$[\boldsymbol{D}]=\begin{bmatrix} 1+D_{11}\sin\left(\dfrac{\pi}{90}\theta\right) & 0 & D_{12}\sin\left(\dfrac{\pi}{45}\theta\right) \\ 0 & 1+D_{22}\sin\left(\dfrac{\pi}{90}\theta\right) & 0 \\ D_{31}\sin\left(\dfrac{\pi}{45}\theta\right) & 0 & 1+D_{33}\sin\left(\dfrac{\pi}{90}\theta\right) \end{bmatrix} \tag{9}$$

显然, 系数 D_{11}、D_{22}、D_{33}、D_{13}、D_{31} 取决于材料的本征属性, 尽管其具体的理论形式目前还很难给出, 但其值必然存在一定的常量特性, 即张量 $\boldsymbol{D}$ 在前述系数不变的条件下, 具有预测弹性应力波跨晶界应力分配的特性。

为验证转换张量 $\boldsymbol{D}$ 的可预测性, 图 10 给出了铜金属在冲击压缩速度为 0.5～1.2 km/s 的条件下, 利用前述获得的应力分配张量 $\boldsymbol{D}$ 预测获得的弹性波跨越晶界后的应力张量分量值与采用分子动力学模拟统计获得的应力分量数据的比较。可见, 应力分配张量预测的冲击波跨越晶界后应力张量分量值(带 c 标记曲线)与根据分子动力学模拟计算结果统计获得的数值基本一致, 说明上述获得的转换张量 $\boldsymbol{D}$ 在弹性波范围内具有可预测性。联系到前述冲击波后的应力生成特征, 可以确定, 应力分配张量 $\boldsymbol{D}$ 反映了冲击波与晶格相互作用的本质特征。

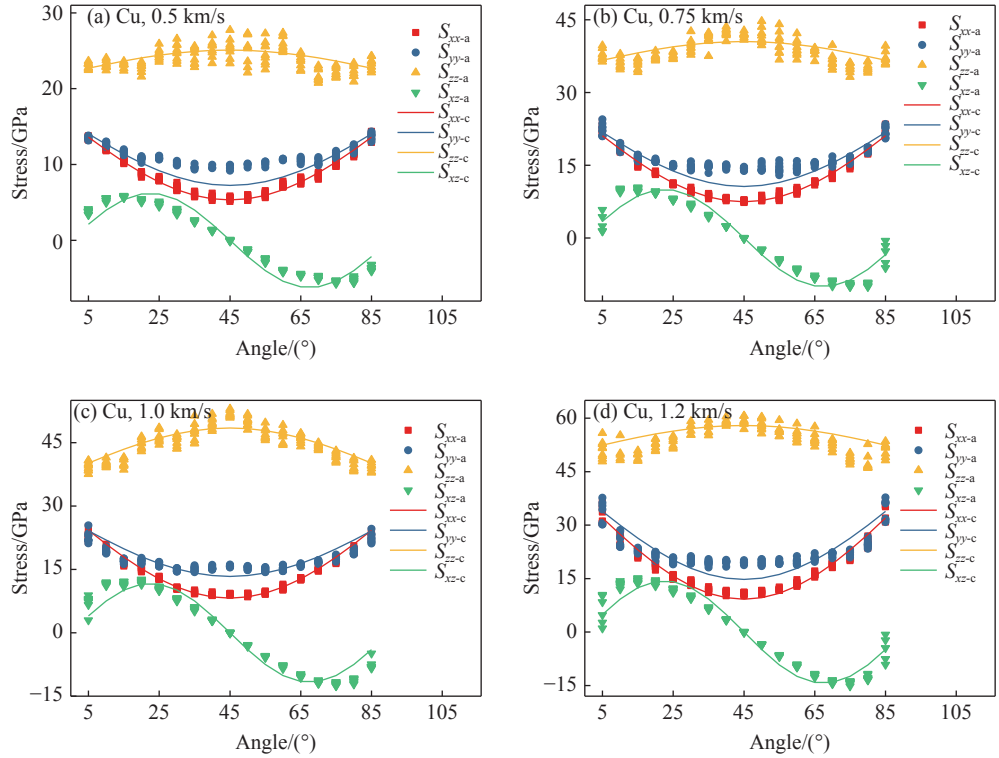


图 10　应力分配张量 $\boldsymbol{D}$ 预测的应力分量与 MD 模拟获得的晶界后应力分量与对比

Fig. 10　Comparison between prediction by tensor $\boldsymbol{D}$ and MD simulation results

3　结　论

采用分子动力学方法研究了冲击波在 FCC 晶格的金属中传播时, {100}晶面内随晶向变化的应力

生成特征和冲击波跨过单一晶界的应力分配机制。

(1)在较低的冲击速度下,不同晶向的 FCC 单晶材料内产生的冲击波明显分为前驱弹性波和后继塑性波的双波结构。即随着晶向角的增加,弹性冲击波波速增加,塑性冲击波波速降低,当$\theta = 45°$时分别达到最大值和最小值,并以 45°晶向工况为中心呈对称分布。随着冲击程度的增强,塑性波逐渐赶上弹性波,双波结构消失,冲击波波速随晶向的各向异性亦消失。

(2)晶向变化对冲击波波后区域及跨晶界前后的应力分配差异主要体现在弹性波范围,主要是沿冲击波运动方向的主应力分量随晶向角度增加逐渐增大而垂直于冲击波运动方向的则相反,分别在 45°时取得极大值和极小值。这种应力生成差异的根源来自晶格原子排列导致的受力差异和原子间作用力机制,而其生成差异的结果恰是不同晶向塑性差异的主要原因。

(3)弹性冲击波跨过晶界前后应力状态存在确定的分配转换关系,通过大量的统计分析,获得了一个在弹性冲击波范围内只与晶向角相关的应力分配张量 $\boldsymbol{D}$。验证表明,对于给定的 FCC 晶格金属,$\boldsymbol{D}$ 具有一致的可预测特性,反映了冲击波与晶格相互作用的本质特征。

从晶格结构探索冲击波应力传播的差异及其影响的研究目前处于起步阶段,本研究讨论了三维 FCC 晶体中的弹性冲击波穿越{100}晶面内单一晶界时的应力变化规律,而实际材料在强冲击下,晶体的晶界处会发射大量位错并伴随晶界的运动,局部的温度也会升高,应力在穿越晶界前后的状态与晶界上的位错运动及晶界运动密切相关。因此,需要深入研究的问题还比较多,也较为复杂,需要非常细致地开展工作,这也是后续研究的重点内容之一。

参考文献:

[1] CAO B, BRINGA E M, MEYERS M A. Shock compression of monocrystalline copper: atomistic simulations [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2007, 38(11): 2681–2688.

[2] BRINGA E M, CAZAMIAS J U, ERHART P, et al. Atomistic shock Hugoniot simulation of single-crystal copper [J]. Journal of Applied Physics, 2004, 96(7): 3793–3799.

[3] BRINGA E M, ROSOLANKOVA K, RUDD R E, et al. Shock deformation of face-centred-cubic metals on subnanosecond timescales [J]. Nature Materials, 2006, 5(10): 805–809.

[4] BRINGA E M, CARO A, VICTORIA M, et al. The atomistic modeling of wave propagation in nanocrystals [J]. JOM, 2005, 57(9): 67–70.

[5] BRINGA E M, CARO A, WANG Y, et al. Ultrahigh strength in nanocrystalline materials under shock loading [J]. Science, 2005, 309(5742): 1838–1841.

[6] WANG Y M, BRINGA E M, MCNANEY J M, et al. Deforming nanocrystalline nickel at ultrahigh strain rates [J]. Applied Physics Letters, 2006, 88(6): 061917.

[7] NEOGI A, MITRA N. A metastable phase of shocked bulk single crystal copper: an atomistic simulation study [J]. Scientific Reports, 2017, 7(1): 7337.

[8] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Shock waves in polycrystalline iron [J]. Physical Review Letters, 2007, 98(13): 135701.

[9] 赵丰鹏. 纳米多孔金属铜冲击响应的分子动力学模拟研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2014.
ZHAO F P. Molecular dynamic simulationj on shock response of nanoporous Cu [D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2014.

[10] 马文, 祝文军, 张亚林, 等. 纳米多晶铁的冲击相变研究 [J]. 物理学报, 2011, 60(6): 066404.
MA W, ZHU W J, ZHANG Y L, et al. Shock-induced phase transformation in nanocrystalline iron [J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(6): 066404.

[11] 马文, 祝文军, 陈开果, 等. 晶界对纳米多晶铝中冲击波阵面结构影响的分子动力学研究 [J]. 物理学报, 2011, 60(1): 016107.
MA W, ZHU W J, CHEN K G, et al. Molecular dynamics investigation of shock front in nanocrystalline aluminum: grain boundary effects [J]. Acta Physica Sinica, 2011, 60(1): 016107.

[12] 马文. 冲击压缩下纳米多晶金属塑性及相变机制的分子动力学研究 [D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2011.

MA W. Molecular dynamics investigations on the mechanisms of plastic deformation and phase transformation of nanocrystalline metals under shock compression [D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2011.

[13] 马文, 陆彦文. 纳米多晶铜中冲击波阵面的分子动力学研究 [J]. 物理学报, 2013, 62(3): 036201.
MA W, LU Y W. Molecular dynamics investigation of shock front in nanocrystalline copper [J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(3): 036201.

[14] MA W, ZHU W J, JING F Q. The shock-front structure of nanocrystalline aluminum [J]. Applied Physics Letters, 2010, 97(12): 121903.

[15] MA W, ZHU W, HOU Y. A comparative study on shock compression of nanocrystalline Al and Cu: shock profiles and microscopic views of plasticity [J]. Journal of Applied Physics, 2013, 114(16): 163504.

[16] 陈开果, 祝文军, 马文, 等. 冲击波在纳米金属铜中传播的分子动力学模拟 [J]. 物理学报, 2010, 59(2): 1225–1232.
CHEN K G, ZHU W J, MA W, et al. Propagation of shockwave in nanocrystalline copper: molecular dynamics simulation [J]. Acta Physica Sinica, 2010, 59(2): 1225–1232.

[17] 邵建立, 王裴, 何安民, 等. 冲击诱导金属铝表面微射流现象的微观模拟 [J]. 物理学报, 2012, 61(18): 184701.
SHAO J L, WANG P, HE A M, et al. Microscopic simulation on shock-induced micro-jet ejection from metal Al surface [J]. Acta Physica Sinica, 2012, 61(18): 184701.

[18] 邵建立, 秦承森, 王裴. 动态压缩下马氏体相变力学性质的微观研究 [J]. 物理学报, 2009, 58(3): 1936–1941.
SHAO J L, QIN C S, WANG P. Atomistic simulation of mechanical properties of martensitic transformation under dynamic compression [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(3): 1936–1941.

[19] 邵建立, 王裴, 秦承森, 等. 铁冲击相变的分子动力学研究 [J]. 物理学报, 2007, 56(9): 5389–5393.
SHAO J L, WANG P, QIN C S, et al. Shock-induced phase transformations of iron studied with molecular dynamics [J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56(9): 5389–5393.

[20] 何安民, 邵建立, 秦承森, 等. 单晶 Cu 冲击加载及卸载下塑性行为的微观模拟 [J]. 物理学报, 2009, 58(8): 5667–5672.
HE A M, SHAO J L, QIN C S, et al. Molecular dynamics study on the plastic behavior of monocrystalline copper under shock loading and unloading [J]. Acta Physica Sinica, 2009, 58(8): 5667–5672.

[21] ARMAN B, LUO S N, GERMANN T C, et al. Dynamic response of $Cu_{46}Zr_{54}$ metallic glass to high-strain-rate shock loading: plasticity, spall, and atomic-level structures [J]. Physical Review B, 2010, 81(14): 144201.

[22] ZONG H, LOOKMAN T, DING X, et al. Anisotropic shock response of titanium: reorientation and transformation mechanisms [J]. Acta Materialia, 2014, 65(4): 10–18.

[23] XIE Y, HAN L B, AN Q, et al. Release melting of shock-loaded single crystal Cu [J]. Journal of Applied Physics, 2009, 105(6): 066103.

[24] LUO S N, GERMANN T C, TONKS D L. The effect of vacancies on dynamic response of single crystal Cu to shock waves [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 107(5): 056102.

[25] YU Y, LI C, MA H H, et al. Deformation and spallation of explosive welded steels under gas gun shock loading [J]. Chinese Physics Letters, 2018, 35(1): 018101.

[26] LUO S N, GERMANN T C, DESAI T G, et al. Anisotropic shock response of columnar nanocrystalline Cu [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 107(12): 123507.

[27] LUO S N, GERMANN T C, TONKS D L, et al. Shock wave loading and spallation of copper bicrystals with asymmetric Σ3 〈110〉 tilt grain boundaries [J]. Journal of Applied Physics, 2010, 108(9): 093526.

[28] WANG L, ZHAO F, ZHAO F P, et al. Grain boundary orientation effects on deformation of Ta bicrystal nanopillars under high strain-rate compression [J]. Journal of Applied Physics, 2014, 115(5): 053528.

[29] CAO F, BEYERLEIN I J, ADDESSIO F L, et al. Orientation dependence of shock-induced twinning and substructures in a copper bicrystal [J]. Acta Materialia, 2010, 58(2): 549–559.

[30] MEYERS M A, CARVALHO M S. Shock-front irregularities in polycrystalline metals [J]. Materials Science and Engineering, 1976, 24(1): 131–135.

[31] BARBER J L, KADAU K. Shock-front broadening in polycrystalline materials [J]. Physical Review B, 2008, 77(14): 144106.

[32] ZHAKHOVSKⅡ V V, ZYBIN S V, NISHIHARA K, et al. Shock wave structure in Lennard-Jones crystal via molecular dynamics [J]. Physical Review Letters, 1999, 83(6): 1175–1178.

[33] GERMANN T C, HOLIAN B L, LOMDAHL P S, et al. Orientation dependence in molecular dynamics simulations of shocked single crystals [J]. Physical Review Letters, 2000, 84(23): 5351–5354.

[34] HOLIAN B L, LOMDAHL P S. Plasticity induced by shock waves in nonequilibrium molecular-dynamics simulations [J]. Science, 1998, 280(5372): 2085–2088.

[35] HOLIAN B L. Molecular dynamics comes of age for shockwave research [J]. Shock Waves, 2004, 13(6): 489–495.
[36] KADAU K, GERMANN T C, LOMDAHL P S, et al. Microscopic view of structural phase transitions induced by shock waves [J]. Science, 2002, 296(5573): 1681–1684.
[37] GERMANN T C, HOLIAN B L, LOMDAHL P S, et al. Dislocation structure behind a shock front in fcc perfect crystals: atomistic simulation results [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2004, 35(9): 2609–2615.
[38] ROBERTSON D H, BRENNER D W, WHITE C T. Split shock waves from molecular dynamics [J]. Physical Review Letters, 1991, 67(22): 3132–3135.
[39] KELCHNER C L, PLIMPTON S J, HAMILTON J C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation [J]. Physical Review B, 1998, 58(17): 11085–11088.
[40] LIU C M, XU C, CHENG Y, et al. Orientation-dependent responses of tungsten single crystal under shock compression via molecular dynamics simulations [J]. Computational Materials Science, 2015, 110: 359–367.
[41] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular-dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1–19.
[42] ZHOU X W, JOHNSON R A, WADLEY H N G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers [J]. Physical Review B, 2004, 69(14): 144113.
[43] Sandia National Laboratories. Lammps users manual [Z]. Albuquerque, NM: Sandia National Laboratories, 2016.
[44] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito-the open visualization tool [J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18(1): 015012.

Preliminary Investigation on Stress Distribution Mechanism of Shock Propagating across Grain Interface in Metal

WANG Xuan, HUANG Shenghong, ZHANG Yongliang

(*CAS Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials*, *University of Science and Technology of China*, *Hefei* 230026, *China*)

Abstract: To know the stress distribution mechanism of shock propagating across grain interface is of great significance to understand the interacting phenomena and plastic principles of shock and polycrystalline metal material. With molecular dynamics (MD), shock impacting on four kinds of metals with FCC (face-centered cubic) crystal lattice are numerically simulated. The stress tensor components distribution, scale and correlations of shock propagating in monocrystal and across grain interface on {100} lattice plane are computed and analyzed. It is concluded as follows: (1) The stress generated after shock propagating along different lattice arrangement orientations presents different characteristics between parallel and perpendicular shock direction, which is in accordance with force interaction difference due to the lattice arrangement and interaction mechanism between atoms. The results of such difference are corresponding to the plasticity variation with lattice orientations. (2) An independent tensor is found to be in charge of stress distribution in elastic shock propagating across a single grain interface. This tensor has uniform style and similar coefficients for different materials with the same lattice arrangement, presenting a kind of generality. (3) The coherent predictability and accuracy of stress distribution tensor for FCC lattice are validated by simulation results for shock impacting on a single grain interfaces at different velocities and lattice arrangement orientations, indicating the intrinsic property of the interaction between shock and lattice atoms.

Keywords: polycrystalline metal; shock wave; grain interface; face-centered cubic; stress; molecular dynamics

DOI: 10.11858/gywlxb.20190723

弹体材料在超高速碰撞过程中的物相演化

李依潇[1,2], 王生捷[2]

(1. 中国航天科工集团第二研究院研究生院, 北京 100854;
2. 北京机械设备研究所, 北京 100854)

摘要: 在碰撞速度大于 10 km/s 的超高速碰撞问题中, 弹体材料大部分发生液化、汽化, 以现有技术手段对此类问题进行实验研究存在一定难度。为深入了解超高速碰撞过程中材料物相的演化规律, 揭示不同密度、熔点的材料在超高速碰撞过程中的物相演化特征, 采用物质点法, 结合 GRAY 三相物态方程, 对铜、镍、铝 3 种金属材料的超高速碰撞问题进行数值模拟研究, 得到不同碰撞速度下弹体材料物相分布随时间变化曲线, 并总结出材料特性和碰撞速度对物相演化的影响规律, 为开展超高速碰撞等效实验提供参考。

关键词: 超高速碰撞; 物质点法; 物相演化; 碰撞速度

中图分类号: O521.2 **文献标识码:** A

超高速碰撞广泛存在于航天、兵器、天文等领域。在超高速碰撞问题的实验研究中, 最常用的加速设备是轻气炮。二级轻气炮可将弹体加速至 8 km/s 左右; 对于弹体速度大于 10 km/s 的超高速碰撞实验, 则通常使用三级轻气炮、电磁炮、爆炸加速器, 然而它们所能发射的弹体质量、尺寸较小, 为此 Piekutowski 等[1−3] 使用二级轻气炮发射镉弹撞击镉靶, 对碰撞速度大于 10 km/s 的铝弹-铝靶工况进行等效实验模拟。在测量技术方面, 目前只能通过碎片云 X 射线照相特征研判、扫描电镜观察校验板金相等间接方法对碎片云的物相进行定性分析, 所能获得的信息有限。受限于现有技术手段, 弹体速度大于 10 km/s 的超高速碰撞实验数据较为缺乏[4]。数值模拟既不受加速设备的限制, 又能提取材料在碰撞过程中的全部状态参数, 在此类问题的研究中具有重要意义。在超高速碰撞过程中, 材料存在大变形、破碎、相变等现象, 开展数值模拟时需采用适宜的离散方法和物态方程。

物质点法(Material Point Method, MPM)是一种采用拉格朗日质点和欧拉网格双重描述的数值计算方法, 综合了网格法和无网格法的优点。其基本思想是: 将连续体离散成一组携带质量、速度、应力、应变、能量等物质信息的质点, 在物质运动区域建立背景网格, 网格仅用于动量方程的求解和空间导数的计算, 在每一个时间步中, 质点与网格完全固连, 在时间步结束时丢弃已变形的背景网格。物质点法既不存在拉格朗日法的网格畸变问题, 也不存在欧拉法的对流项, 且计算效率优于光滑粒子流体动力学(SPH)方法[5], 非常适合超高速碰撞问题分析。

在超高速碰撞研究中, 材料的可压缩性不能忽略, 材料的压力需使用物态方程计算。物态方程是用于描述物质压力、内能、体积关系的函数。采用物质点法模拟的每一个时间步内, 通过将所求得的质点体积 V、内能 E 代入物态方程, 解得当前时刻质点的压力 P。在碰撞速度大于 10 km/s 的超高速碰撞问题中, 弹体材料大部分发生液化、汽化, 使用单一相区物态方程难以准确求解材料的压力。GRAY 三相物态方程是 Royce 在 Grover 液态金属模型与 Young-Alder 修正范德瓦尔斯方程基础上建立的一种非常实用的三相物态方程模型, 在数值计算中的应用非常广泛。

本研究结合物质点法和 GRAY 三相物态方程, 对铜、镍、铝 3 种金属的超高速碰撞问题进行数值模拟, 以获得不同碰撞速度下弹体材料的物相分布随时间变化曲线, 揭示不同密度、熔点的材料在超高速碰撞过程中的物相演化特征, 为深入理解超高速碰撞过程提供参考。

* **收稿日期:** 2019-01-29; **修回日期:** 2019-03-01

作者简介: 李依潇(1990—), 男, 博士研究生, 主要从事冲击动力学研究. E-mail: oldcoon@sina.com

1　物质点法的基本原理

在超高速碰撞问题中，碰撞点附近区域的压力远远大于材料本身强度，可以认为该区域的材料是可压缩流体；材料在超高速碰撞中的变形过程很短暂，可以忽略热传导效应。轴对称冲击动力学分析常使用柱坐标形式的更新拉格朗日格式控制方程，具体形式如下。

质量守恒方程

$$\frac{\mathrm{D}\rho}{\mathrm{D}t}+\rho\left(\frac{\partial v_r}{\partial r}+\frac{v_r}{r}+\frac{\partial v_z}{\partial z}\right)=0 \tag{1}$$

动量守恒方程

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\partial\sigma_{rr}}{\partial r}+\dfrac{\sigma_{rr}-\sigma_{\theta\theta}}{r}+\dfrac{\partial\sigma_{zr}}{\partial z} \\ \dfrac{\partial\sigma_{zr}}{\partial r}+\dfrac{\sigma_{zr}}{r}+\dfrac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z} \end{bmatrix}=\rho\begin{bmatrix} \ddot{u}_r \\ \ddot{u}_z \end{bmatrix} \tag{2}$$

能量守恒方程

$$\rho\dot{e}=\sigma_{rr}\frac{\partial v_r}{\partial r}+\sigma_{\theta\theta}\frac{v_r}{r}+\sigma_{zr}\left(\frac{\partial v_r}{\partial z}+\frac{\partial v_z}{\partial r}\right)+\sigma_{zz}\frac{\partial v_z}{\partial z} \tag{3}$$

式中：ρ为当前密度，t 为时间，r、z 为微元坐标，v_r、v_z 为速度，σ_{rr}、σ_{rz}、σ_{zr}、$\sigma_{\theta\theta}$为柯西应力，$\ddot{u}_r$、$\ddot{u}_z$为加速度，e 为单位质量内能。

物质点法将连续体离散为一系列质点，质点的运动代表了物体的运动，质点携带物体的所有物质信息，背景网格结点不存储任何物质信息。物质点法采用质点积分，即将虚功方程中的各项积分转化为被积函数在各质点处的值与该质点所代表的体积乘积之和。在求解动量方程时，质点和背景网格完全固连，随着背景网格一起运动，质点和网格结点之间通过形函数 N_{Ip} 建立信息的映射。质点携带的位移、应力等信息的导数，可以由结点信息插值得到[6]。

物质点法的求解格式如下（其中：下标 p 表示质点携带的变量；下标 I 表示背景网格结点携带的变量；i=r, z; j=r, z）。

（1）将质点的质量和动量通过形函数 N_{Ip} 映射到背景网格结点，求得结点质量和动量，分别表示为

$$m_I=\sum_{p=1}^{n_p}N_{Ip}m_p \tag{4}$$

$$p_{rI}=\sum_{p=1}^{n_p}N_{Ip}m_pv_{rp},\quad p_{zI}=\sum_{p=1}^{n_p}N_{Ip}m_pv_{zp} \tag{5}$$

（2）对结点动量施加边界条件，进行修正；

（3）由结点的质量和动量求得结点速度，由此计算质点速度梯度、应变增量和旋量增量，更新质点的体积、应力偏量、内能，其中质点位移导数表示为

$$u_{ip,j}=N_{Ip,j}u_{iI} \tag{6}$$

（4）通过物态方程求解质点的压力；

（5）计算背景网格结点的合力，并根据边界条件进行修正，更新背景网格结点动量，其中结点内力为

$$\begin{cases} f_{rI}^{\mathrm{int}}=-\dfrac{m_p}{\rho_p}\displaystyle\sum_{p=1}^{n_p}\left(N_{Ip,r}\sigma_{rrp}+N_{Ip,z}\sigma_{zrp}+\frac{N_{Ip}}{r_p}\sigma_{\theta\theta p}\right) \\ f_{zI}^{\mathrm{int}}=-\dfrac{m_p}{\rho_p}\displaystyle\sum_{p=1}^{n_p}\left(N_{Ip,r}\sigma_{zrp}+N_{Ip,z}\sigma_{zzp}\right) \end{cases} \tag{7}$$

（6）将背景网格结点位置、速度的变化量映射回质点，更新质点的位置和速度，质点坐标和位移为

$$r_p=N_{Ip}r_I,\quad z_p=N_{Ip}z_I \tag{8}$$

$$u_{rp}=N_{Ip}u_{rI},\quad u_{zp}=N_{Ip}u_{zI} \tag{9}$$

（7）丢弃已变形的网格，在下一时间步使用未变形的新网格。

2　材料模型

材料模型描述材料在外力作用下的响应，包括本构模型、失效模型和物态方程。

本构模型用于描述材料的偏应力与偏应变的关系, 偏应力更新算法表示为

$$s_{ij}^{n+1}=s_{ij}^{n}+\left(s_{ik}^{n}\Omega_{jk}^{n+1/2}+s_{jk}^{n}\Omega_{ik}^{n+1/2}\right)\Delta t+2G_0\left(\dot{\varepsilon}_{ij}^{n+1/2}-\frac{1}{3}\dot{\varepsilon}_{kk}^{n+1/2}\delta_{ij}\right)\Delta t \tag{10}$$

式中: $\dot{\varepsilon}_{ij}=0.5(v_{i,j}+v_{j,i})$为变形率张量分量; $\Omega_{jk}=0.5(v_{j,k}-v_{k,j})$为旋量张量分量; G_0 为剪切模量; $i=r,z,\theta$; $j=r,z,\theta$; $k=r,z,\theta$。

材料在超高速碰撞过程中的屈服应力可用 Johnson-Cook 模型表示

$$\sigma_{\mathrm{y}}=[A+B(\varepsilon^{\mathrm{p}})^{n}](1+C\ln\dot{\varepsilon}^{*})(1-T^{*m}) \tag{11}$$

式中: ε^{p}为等效塑性应变, $\dot{\varepsilon}^{*}$为无量纲等效塑性应变率, T^{*}为无量纲温度, A、B、C、n、m 为材料常数。

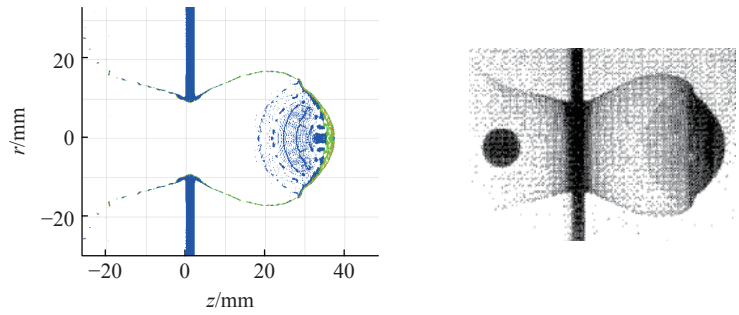
超高速碰撞问题涉及材料的冲击破坏, 本研究使用联合失效模型进行描述。当质点的拉应力大于给定值或温度高于熔点时, 质点失效。失效质点的应力偏量为零, 且不能承受拉应力。

在 GRAY 三相物态方程中, 以搭接体积 V_{J} 为分界, 物质的状态被划分为固-液和液-气两大相区, 其中固-液相区又被划分为固相、熔化相(固液混合相)、液相和热液相 4 个分区。热液相是指在高压条件下未发生汽化的高温液体, 当液相物质的内能继续增加时, 若存在高压环境阻碍物质的膨胀, 使其体积不能超过 V_{J}, 则在内能超过阈值后物质进入热液相, 若环境压力不足以使物质体积小于 V_{J}, 则物质进入液-气相。在固-液相区, 物质的状态由 Grover 定标律方程描述; 在液-气相区, 气态由 Young-Alder 方程描述, 液气共存区采用麦克斯韦等面积法则处理[7]。GRAY 三相物态方程在理论上并不严格, 其液-气相区的具体计算结果并不可靠, 考虑到本研究主要关注材料在超高速碰撞过程中的物相演化, 液-气相只是物相演化过程的最终状态之一, 因此 GRAY 三相物态方程在液-气相区存在的问题对物相演化过程造成的影响很小。

在 GRAY 三相物态方程的原始表达中, 冷能和冷压从以冲击绝热线为参考线的 Mie-Grüneisen 物态方程导出, 在求解温度等状态参数时, 使用由 Mie-Grüneisen 物态方程导出的冷能、冷压数据会导致状态参数表达形式繁琐。本研究使用分子动力学方法直接求解冷能 E_{c}、冷压 P_{c}, 利用内能 E 确定物质所处相区, 计算压力、温度等状态参数。该方法的具体实现方式是: 首先利用分子动力学方法获得冷能、冷压与体积的对应关系, 建立包含足够多数据点的数表, 在使用物质点法模拟超高速碰撞时, 根据质点在该时刻的体积, 利用插值法求得质点的冷能、冷压, 此种冷能、冷压的求解方式不会导致计算量激增, 详见文献 [8]。物态方程的具体表达形式及参数见附录 A。

3　数值方法验证

为验证本研究的数值方法, 选取 Piekutowski 编号为 4-1352 的实验工况[1], 弹体和靶体材料均为铝合金, 弹体直径 9.5 mm, 靶厚 2.2 mm, 碰撞 6.6 μs 后的碎片云如图 1(b) 所示, 碎片云长 37.7 mm, 宽 34.2 mm。弹体和靶体的离散尺寸选取 0.05 mm, 质点总数 58 010, 背景网格尺寸采用 0.1 mm, 碰撞 6.6 μs 后的数



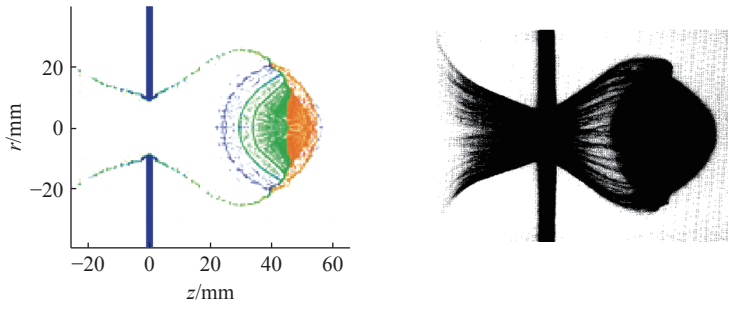
(a) Numerical result　　(b) Experimental result

图 1　数值模拟结果与 4-1352 实验结果的对比

Fig. 1　Comparison between numerical result and experimental result of 4-1352

值模拟结果如图 1(a) 所示, 图中蓝色表示材料处于固相, 绿色表示材料处于熔化相。在数值模拟结果中, 碎片云长 37.0 mm, 宽 33.3 mm, 与实验结果的相对偏差小于 3%, 且碎片云前部呈现出与实验结果相似的阶梯状, 证明本数值方法可以较好地模拟超高速碰撞。

由于碰撞速度大于 10 km/s 的超高速碰撞实验较难实现, 因此选取 Piekutowski 编号为 4-1432 的镉弹-镉靶等效实验[1−2] 进行对比。在 4-1432 实验中, 镉弹以 5 km/s 的速度撞击镉靶体, 根据 Poormon 和 Piekutowski 的观点[2], 4-1432 实验结果可以等效为具有相同弹径-靶厚之比的 10 km/s 铝弹-铝靶碰撞。在数值模拟中, 弹体和靶体的材料均为铝合金, 弹径为 10 mm, 靶厚 1.6 mm, 弹体以 10 km/s 的速度撞击靶体。弹体和靶体的离散尺寸选取 0.05 mm, 质点总数 47 532, 背景网格尺寸采用 0.1 mm, 碰撞 5.7 μs 后的数值模拟结果如图 2(a) 所示, 图中蓝色表示固相, 绿色表示熔化相, 橙色表示液相, 黄色表示热液相, 红色表示液-气相。数值模拟结果与等效实验所得碎片云 (图 2(b)) 在形态上具有较高的相似性, 且图 2(a) 中碎片云前部的材料分布符合 Piekutowski 对等效实验结果的分析描述[1], 证明本研究所述方法能够对碰撞速度在 10 km/s 量级的超高速碰撞问题进行有效模拟, 数值模拟所得的物相分布与实际碰撞中的物相分布存在紧密联系。



(a) Numerical result　　(b) Experimental result

图 2　数值模拟结果与 4-1432 实验结果的对比

Fig. 2　Comparison between numerical result and experimental result of 4-1432

4　数值模拟结果及分析

4.1　参数设置

本算例选取直径为 10 mm 的球体作为入射弹体, 厚度为 2 mm 的薄板作为靶体。铜和镍的密度设为 8.9 g/cm^3, 铝的密度设为 2.7 g/cm^3, 材料的失效拉应力按 Grady 失效模型计算, 材料模型参数见表 1 及附录 A。弹体和靶体的离散尺寸为 0.05 mm, 质点总数为 55 532, 背景网格尺寸为 0.1 mm。弹体的入射速度选取 4、5、6、7、8、9、10、12 和 14 km/s。

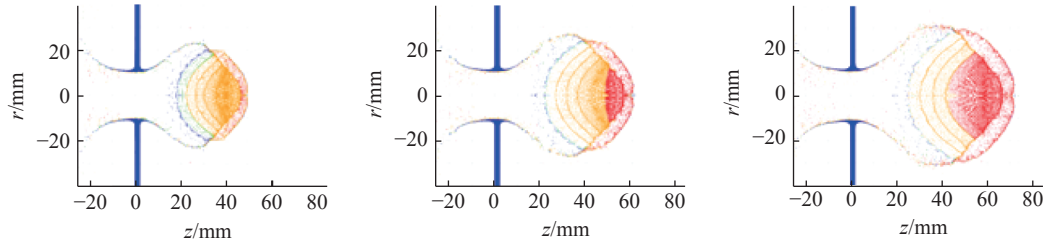
表 1　材料参数

Table 1　Material parameters

Material	G_0/GPa	A/MPa	B/MPa	C	n	m
Al	27.6	265	426	0.015	0.34	1.00
Cu	43.9	90	292	0.025	0.31	1.09
Ni	80.2	163	648	0.006	0.33	1.44

4.2　铜弹-铜靶超高速碰撞碎片云

对于铜弹-铜靶超高速碰撞, 碰撞 5 μs 后部分工况的碎片云如图 3 所示, 其中蓝色、绿色、橙色、黄色和红色分别表示固相、熔化相、液相、热液相和液-气相。当碰撞速度大于 10 km/s 时, 弹体材料大部分发生液化、汽化, 处于液-气相区的材料分布形态与 Piekutowski[1] 对其实验结果中碎片云前部的描述相符, 表明本研究受 GRAY 三相物态方程固有缺陷的影响很小, 数值模拟方法可用且有效。



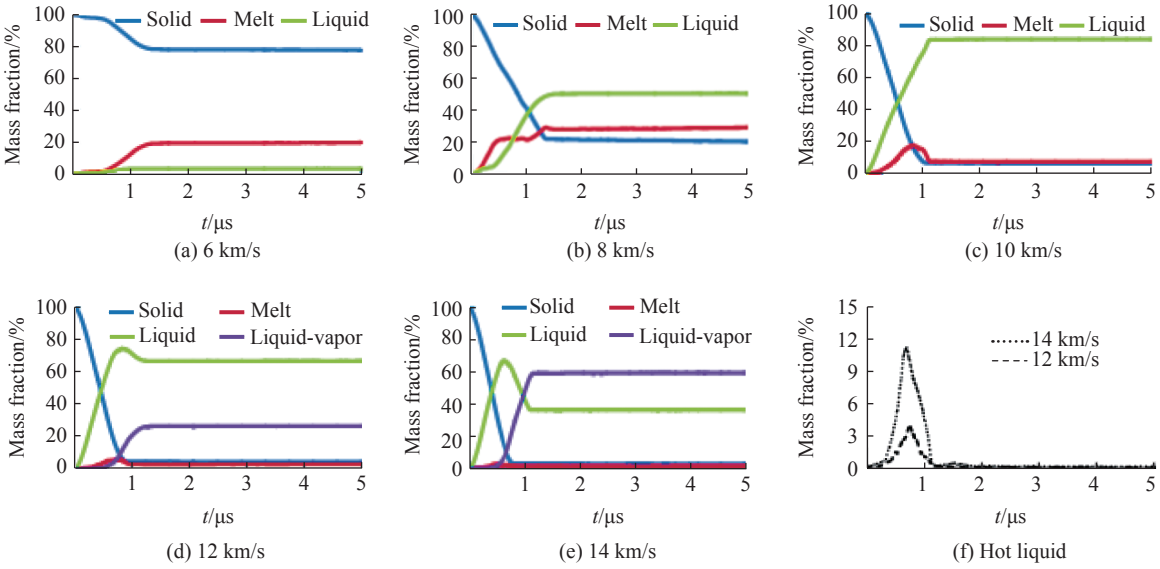
(a) 10 km/s　(b) 12 km/s　(c) 14 km/s

图 3　铜弹-铜靶在不同碰撞速度下的碎片云

Fig. 3　Debris clouds of Cu-Cu hypervelocity impacts at different impact velocities

4.3　铜、镍、铝在超高速碰撞中的物相演化

对于铜弹-铜靶超高速碰撞，当弹体的入射速度低于 5 km/s 时，弹体材料绝大部分（96% 以上）仍保持固相，为此仅选取弹体速度在 6 km/s 以上的工况。弹体速度为 6、8、10、12 和 14 km/s 时，弹体材料的物相分布随时间变化曲线如图 4 所示，图中蓝色、红色、绿色和紫色曲线分别表示固相、熔化相、液相和液-气相。在图 4(a)、图 4(b) 和图 4(c) 中，热液相和液-气相的质量分数较小（小于 5%），故图中没有表示。热液相是 $T>T_G$ (T_G 为液相摩尔热容减小到与单原子分子理想气体摩尔热容相当的温度) 的高温高压液体，只在碰撞过程的部分时间段出现，碰撞速度小于 12 km/s 时热液相的质量分数较小（小于 5%），12 km/s 和 14 km/s 两种工况的热液相质量分数随时间变化曲线见图 4(f)。



(a) 6 km/s　(b) 8 km/s　(c) 10 km/s

(d) 12 km/s　(e) 14 km/s　(f) Hot liquid

图 4　物相分布随时间变化曲线（铜弹-铜靶超高速碰撞）

Fig. 4　The relation curves of phase distribution vs. time (Hypervelocity impact of Cu-Cu)

图 4(a) 中，由于碰撞速度相对较低（6 km/s），在碰撞初始阶段，固相的质量分数缓慢下降，熔化相的质量分数缓慢上升，随着碰撞过程中弹体动能转化为材料的内能，当能量积累达到阈值后，固相以较快速度转化为熔化相。图 4(b) 中，由于碰撞速度高于图 4(a)，从碰撞起始固相就以较高速度转化为熔化相，液相的质量分数则经过能量积累才以较高速度上升。图 4(c) 中，由于碰撞速度相对较高（10 km/s），液相的质量分数从碰撞起始就以较高速度上升；在碎片云膨胀阶段，部分处于熔化相的材料在外部压力减小后转化为液相。图 4(d) 中，同样出现了图 4(c) 中的卸载液化现象，且由于碰撞速度较高（12 km/s），还出现液相转化为液-气相的卸载汽化现象。图 4(e) 中，碰撞速度达到 14 km/s，卸载汽化现象更加明显。

镍的密度与铜接近，但熔点高于铜。图 5(a) 中，当碰撞速度为 12 km/s 时，镍弹-镍靶工况没有出现图 4(d) 中的卸载汽化现象，而出现较明显的卸载液化现象，曲线形态与图 4(c) 相似。图 5(b) 中，出现了

与图 4(d) 相似的卸载汽化现象。图 5(a) 和图 5(b) 与图 4(c)、图 4(d)、图 4(e) 的对比说明，高熔点材料的液化及汽化能量阈值高于低熔点材料，高熔点材料的物相分布随时间变化曲线与低熔点材料在碰撞速度较低时的曲线有相似性。

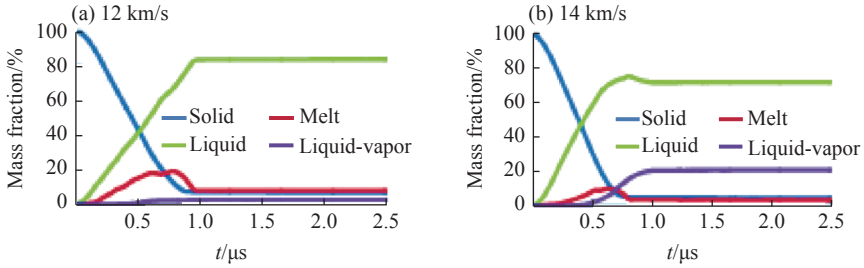


图 5　物相分布随时间变化曲线(镍弹-镍靶超高速碰撞)

Fig. 5　The relation curves of phase distribution vs. time (Hypervelocity impact of Ni-Ni)

铝的密度和熔点均小于铜，图 6(a) 中出现了与图 4(c) 相似的卸载液化现象。图 6(b) 中，虽然碰撞速度达到 14 km/s，但是仍没有明显的卸载汽化现象，除液-气相的质量分数较高、熔化相的质量分数较低之外，曲线形态仍与图 4(c) 相似。图 6(a) 和图 6(b) 与图 4(c)、图 4(d)、图 4(e) 的对比说明，高密度材料弹体的动能较大，高密度材料的物相分布随时间变化曲线与低密度材料在碰撞速度较高时的曲线有相似性。

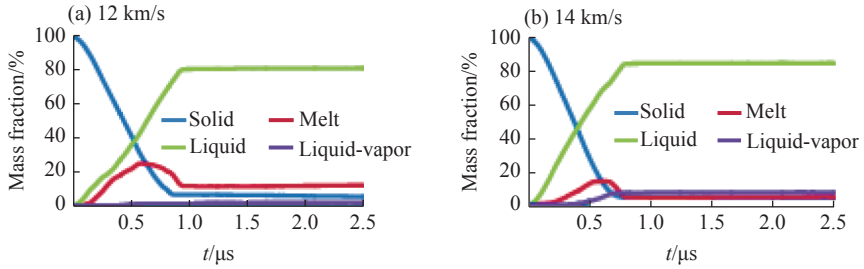


图 6　物相分布随时间变化曲线(铝弹-铝靶超高速碰撞)

Fig. 6　The relation curves of phase distribution vs. time (Hypervelocity impact of Al-Al)

铜、镍、铝 3 种金属弹体在超高速碰撞过程中趋于稳定后的物相分布与碰撞速度的关系见图 7。在本研究的工况中，对于铜弹-铜靶，5 km/s 和 6 km/s 分别是熔化相和液相开始快速增加的特征碰撞速度，7 km/s 是熔化相质量分数开始下降的特征碰撞速度，10 km/s 是液-气相质量分数开始快速增加、液相质量分数开始下降的特征碰撞速度；对于镍弹-镍靶，6 km/s 和 7 km/s 分别是熔化相和液相开始快速增加的特征碰撞速度，8 km/s 是熔化相质量分数开始下降的特征碰撞速度，12 km/s 是液-气相质量分数开始快速增加、液相质量分数开始下降的特征碰撞速度；对于铝弹-铝靶，6 km/s 和 7 km/s 分别是熔化

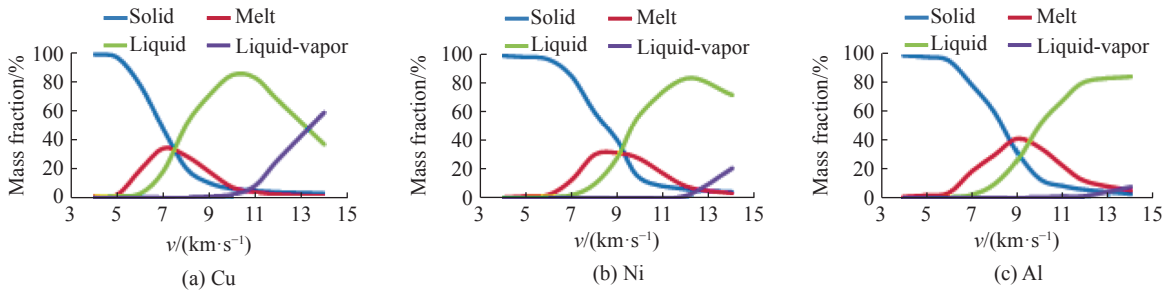


图 7　物相分布随碰撞速度变化曲线

Fig. 7　The relation curves of phase distribution vs. impact velocity

相和液相开始快速增加的特征碰撞速度, 9 km/s 是熔化相质量分数开始下降的特征碰撞速度, 12 km/s 是液-气相质量分数开始快速增加的特征碰撞速度, 液相质量分数直到 14 km/s 也未发生明显下降。

铜、镍、铝 3 种不同密度、熔点金属的超高速碰撞数值模拟结果表明: 不同熔点、密度的材料在超高速碰撞过程中具有相似的物相演化特征。对于密度相近的材料, 熔点较高材料的物相分布随碰撞速度的变化曲线相对熔点较低材料存在沿速度轴整体性右移现象。铜的熔点和密度均高于铝, 铝的物相分布随碰撞速度变化曲线相对于铜也存在沿速度轴整体性右移现象, 原因是铝的密度较小, 相同尺寸的弹体在较高速度下的动能具有与铜弹在较低速度时相同的动能。因此, 在超高速碰撞过程中, 高密度、低熔点金属材料在碰撞速度较低时的物相分布与低密度、高熔点金属材料在碰撞速度较高时的物相分布相似。

Piekutowski 等[1−2] 用较低碰撞速度下的镉弹-镉靶(镉的密度高于铝, 熔点低于铝)模拟较高碰撞速度下的铝弹-铝靶, 通过观察碎片云形态, 认为碰撞速度为 v 的镉弹-镉靶实验可以等效碰撞速度为 $2v$ 的铝弹-铝靶实验 (Mullin 等[9] 认为比例系数约为 2.65), 其实验结果有效地证明二者的物相演化特征具有相似性。由于镉不是常见结构材料, 其物态方程参数较难获取, 因此本研究无法对镉弹-镉靶的超高速碰撞进行数值模拟。铜的密度与镉接近, 而熔点高于镉; 由图 7(a) 和图 7(c) 可知, 铝的特征碰撞速度约为铜特征碰撞速度的 1.2～1.3 倍; 由图 8 可知, 对于碰撞速度为 v 的铜弹-铜靶工况, 碎片云在形态、物相分布等方面均与碰撞速度约为 $1.25v$ 的铝弹-铝靶工况的碎片云存在较大的相似性, 表明可以利用碰撞速度为 v 的铜弹-铜靶实验等效碰撞速度为 $1.25v$ 的铝弹-铝靶实验。镉的熔点低于铜, 可用于进行比例系数更大的等效实验。

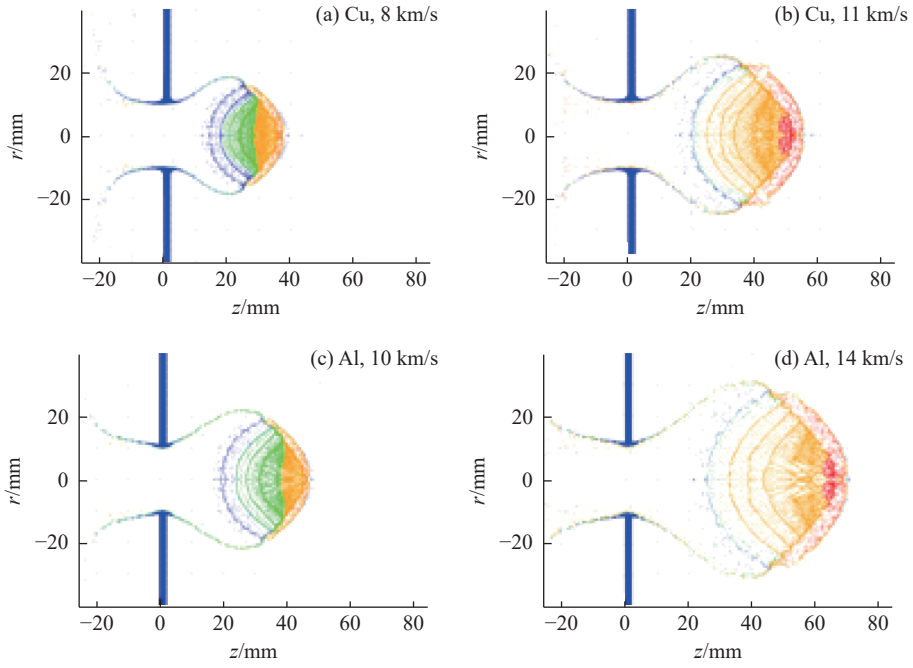


图 8　铜弹-铜靶和铝弹-铝靶碰撞产生的碎片云对比

Fig. 8　Comparison of debris clouds formed by hypervelocity impact between Cu-Cu and Al-Al

5　结　论

(1)将物质点法与 GRAY 三相物态方程相结合, 可以有效模拟碰撞速度在 10 km/s 以上的超高速碰撞;

(2)对于给定工况, 不同密度、熔点材料的物相分布随碰撞速度的变化曲线在形态上具有相似性, 但是由于密度(弹体动能)和熔点(相变能量阈值)不同, 物相分布随碰撞速度变化曲线的特征碰撞速度不同, 密度较大、熔点较低的材料, 其特征碰撞速度相对较小;

(3)使用镉弹-镉靶能够对铝弹-铝靶在更高速度的碰撞进行等效实验模拟的原因是,镉的密度高于铝而熔点低于铝,镉弹-镉靶超高速碰撞的物相分布随碰撞速度的变化曲线相对于铝沿速度轴整体性左移,所以隔弹-镉靶在较低的碰撞速度下呈现出与铝弹-铝靶在较高碰撞速度下相似的物相分布,从而在碎片云形态上具有相似性;

(4)本研究主要基于数值模拟,目前尚缺乏直接实验验证的技术条件,所得结论存在一定的局限性。

参考文献:

[1] PIEKUTOWSKI A J. Formation and description of debris clouds produced by hypervelocity impact: NASA Contractor Report 4707 [R]. USA: Marshall Space Flight Center, 1996.

[2] POORMON K L, PIEKUTOWSKI A J. Comparisons of cadmium and aluminum debris clouds [J]. International Journal of Impact Engineering, 1995, 17(4/5/6): 639–648.

[3] SCHMIDT R M, HOUSEN K R, PIEKUTOWSKI A J, et al. Cadmium simulation of orbital-debris shield performance to scaled velocities of 18 km/s [J]. Journal of Spacecraft and Rockets, 1994, 31(5): 866–877.

[4] 唐蜜. 基于欧拉方法的超高速撞击程序研制及碎片云物相分布数值模拟 [D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2015: 3–8.

[5] MA S, ZHANG X, QIU X M. Comparison study of MPM and SPH in modeling hypervelocity impact problems [J]. International Journal of Impact Engineering, 2009, 36(2): 272–282.

[6] 张雄, 廉艳平, 刘岩, 等.物质点法 [M]. 北京: 清华大学出版社, 2013: 46–50.

[7] 汤文辉, 张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 2 版. 北京: 高等教育出版社, 2008: 159–167.

[8] 李依潇, 王生捷. 使用新型物态方程的超高速碰撞物质点法模拟 [J/OL]. 爆炸与冲击 [2019-01-29]. http://kns.cnki.net/kcms/detail/51.1148.O3.20181203.1126.006.html.
LI Y X, WANG S J. Simulation of hypervelocity impact by the material point method coupled with a new equation of state [J/OL]. Explosion and Shock Waves [2019–01–29]. http://kns.cnki.net/kcms/detail/51.1148.O3.20181203.1126.006.html.

[9] MULLIN S A, ANDERSON JR C E, WILBECK J S. Dissimilar material velocity scaling for hypervelocity impact [J]. International Journal of Impact Engineering, 2003, 29: 469–485.

[10] ROYCE E B. GRAY, a three-phase equation of state for metals: UCRL-51121 [R]. USA: Lawrence Livermore National Laboratory, 1971.

附录 A　GRAY 三相物态方程

本研究采用的GRAY三相物态方程如下。

设 m 为物质点的质量,M 为材料的摩尔质量,物理量加撇表示经过除以 M 换算,R 为普适气体常量,G_e为常态电子比热容系数,ΔS为熔化熵,$\alpha=0.15R$,$\Gamma=3R/2\alpha$,γ为 Grüneisen 系数,γ_e为电子的 Grüneisen 系数,T_m 为熔点,δT为熔化相温度范围的一半,E_{m1} 为区分固相与熔化相的内能值,E_{m2} 为区分熔化相与液相的内能值,μ 是与熔化程度相关的参数,E_G 为区分液相与热液相的内能值。

当 $V<V_J$ 且 $E<E_{m1}$ 时(固相)

$$\begin{cases} E = E_c + m\left(3R'T + \dfrac{1}{2}G'_eT^2\right) \\ P = P_c + m\left(\dfrac{\gamma}{V}\cdot 3R'T + \dfrac{\gamma_e}{V}\cdot\dfrac{1}{2}G'_eT^2\right) \end{cases} \tag{A1}$$

当 $V<V_J$ 且 $E_{m1}\leqslant E\leqslant E_{m2}$ 时(熔化相)

$$\begin{cases} E = E_c + m\left[3R'T + \dfrac{1}{2}G'_eT^2 + \mu(T-\mu\delta T)(\Delta S'-\alpha')\right] \\ P = P_c + m\left[\dfrac{\gamma}{V}\cdot 3R'T + \dfrac{\gamma_e}{V}\cdot\dfrac{1}{2}G'_eT^2 + \dfrac{\lambda}{V}\mu T_m(\Delta S'-\alpha')\right] \end{cases} \tag{A2}$$

当 $V<V_J$ 且 $E_m\leqslant E\leqslant E_G$ 时(液相)

$$\begin{cases} E = E_{\mathrm{c}} + m\left\{3R'T + \dfrac{1}{2}G'_{\mathrm{e}}T^2 + T_{\mathrm{m}}\left[\Delta S' - \dfrac{\alpha'}{2}\left(1 + \dfrac{T^2}{T_{\mathrm{m}}^2}\right)\right]\right\} \\ P = P_{\mathrm{c}} + m\left\{\dfrac{\gamma}{V}\cdot 3R'T + \dfrac{\gamma_{\mathrm{e}}}{V}\cdot\dfrac{1}{2}G'_{\mathrm{e}}T^2 + \dfrac{\lambda}{V}T_{\mathrm{m}}\left[\Delta S' - \dfrac{\alpha'}{2}\left(1 + \dfrac{T^2}{T_{\mathrm{m}}^2}\right)\right]\right\} \end{cases} \tag{A3}$$

当 $V<V_{\mathrm{J}}$ 且 $E>E_{\mathrm{G}}$ 时（热液相）

$$\begin{cases} E = E_{\mathrm{c}} + m\left\{\dfrac{3}{2}R'T + \dfrac{1}{2}G'_{\mathrm{e}}T^2 + T_{\mathrm{m}}\left[\Delta S' + \dfrac{\alpha'}{2}\left(\Gamma^2 - 1\right)\right]\right\} \\ P = P_{\mathrm{c}} + m\left\{\dfrac{2\gamma-\lambda}{V}\cdot\dfrac{3}{2}R'T + \dfrac{\gamma_{\mathrm{e}}}{V}\cdot\dfrac{1}{2}G'_{\mathrm{e}}T^2 + \dfrac{\lambda}{V}T_{\mathrm{m}}\left[\Delta S' + \dfrac{\alpha'}{2}\left(\Gamma^2 - 1\right)\right]\right\} \end{cases} \tag{A4}$$

当 $V\geqslant V_{\mathrm{J}}$ 时（液-气相）

$$\begin{cases} E = \dfrac{3}{2}mR'T - \dfrac{m^2 a'_{\mathrm{y}}}{V} + F_E\left(C_1 - C_3T^2\right) + \left(D_1 + D_2T + D_3T^2\right) \\ P = \dfrac{mR'T}{V}Z - \dfrac{m^2 a'_{\mathrm{y}}}{V^2} + F_P\left(C_1 + C_2T + C_3T^2\right) \end{cases} \tag{A5}$$

式中: T 为物质点温度, a'_{y}为常量, Z、F_E、F_P、C_1、C_2、C_3、D_1、D_2、D_3 为系数。

$$\begin{cases} z_{\mathrm{g}} = V_{\mathrm{b}}/V, \quad Z = \dfrac{1 + z_{\mathrm{g}} + z_{\mathrm{g}}^2 - z_{\mathrm{g}}^3}{\left(1 - z_{\mathrm{g}}\right)^3}, \quad D_1 = E_{\mathrm{cJ}} + mT_{\mathrm{mJ}}\left[\Delta S' + \dfrac{\alpha'}{2}\left(\Gamma^2 - 1\right)\right] + \dfrac{m^2 a'_{\mathrm{y}}}{V_{\mathrm{J}}} \\ C_1 = P_{\mathrm{cJ}} + \dfrac{m^2 a'_{\mathrm{y}}}{V_{\mathrm{J}}^2} + \lambda_{\mathrm{J}}T_{\mathrm{mJ}}\left[\Delta S' + \dfrac{\alpha'}{2}\left(\Gamma^2 - 1\right)\right]\dfrac{m}{V_{\mathrm{J}}}, \quad C_2 = \left(2\gamma_{\mathrm{J}} - \lambda_{\mathrm{J}}\right)\dfrac{3}{2}R'\dfrac{m}{V_{\mathrm{J}}} - \dfrac{R'm}{V_{\mathrm{J}}}\dfrac{1 + z_{\mathrm{J}} + z_{\mathrm{J}}^2 - z_{\mathrm{J}}^3}{\left(1 - z_{\mathrm{J}}\right)^3} \end{cases} \tag{A6}$$

以上各式中, 下标 J 表示变量在 $V=V_{\mathrm{J}}$ 时的值, V_{b} 为常量。表 A1 列出了物态方程参数。本研究未给出表达式的变量、未给出具体数值的参数见文献 [10]。

表 A1　物态方程参数

Table A1　Parameters of equation of state

Material	G/(Pa·cm^3·mol^{-1}·K^{-2})	V_{b}/V_0	V_{J}/V_0	a'_{y}/(GPa·cm^6·g^{-2})	M/(g·mol^{-1})
Al	870	0.53	1.347 1	6 450	27.0
Cu	490	0.50	1.401 3	868	63.5
Ni	1 010	0.51	1.407 5	1 190	58.7

Material Phase Evolution in Hypervelocity Impact Process

LI Yixiao[1,2], WANG Shengjie[2]

（1. *Graduate School of Second Academy of CASIC*, *Beijing* 100854, *China*;

2. *Beijing Institute of Mechanical Equipment*, *Beijing* 100854, *China*）

Abstract: It is generally known that phase evolution characteristics of materials under hypervelocity impact obtained are limited by experiments. In this paper, the material point method and GRAY three-phase equation of state were combined to simulate the hypervelocity impact of Cu-Cu, Ni-Ni and Al-Al at different velocities, and the relations between phase distribution and time were obtained. The numerical results show that the phase evolution character of the material with higher density and lower melting point at lower velocity impact is similar to the material with lower density and higher melting point at higher velocity impact. Therefore, the phase evolution characteristics of material with higher density and lower melting under hypervelocity impact point could provide reference to the experiment of common structure materials such as Al under hypervelocity impact.

Keywords: hypervelocity impact; material point method; phase evolution; impact velocity

DOI: 10.11858/gywlxb.20180650

聚脲涂覆钢板在爆炸载荷作用下的动态响应

王殿玺, 郭香华, 张庆明

(北京理工大学机电学院, 北京 100081)

摘要: 在验证了所用方法有效性的基础上, 采用有限元软件 LS-DYNA 数值模拟了等面密度聚脲涂覆钢板结构及单一钢板在空爆下的动态响应, 分析了聚脲涂覆位置对其抗爆性的影响; 在此基础上, 通过量纲分析的方法讨论了爆心距、炸药质量、涂覆聚脲厚度对钢板变形的影响规律。结果表明, 聚脲涂覆在钢板上的位置影响其抗爆性能。其他变量一定的情况下, 钢板中心最大位移随爆心距的增加近似呈指数递减趋势; 改变炸药质量时, 钢板中心最大位移随炸药质量的增加近似呈线性递增趋势; 改变涂覆聚脲厚度时, 钢板中心最大位移随涂层厚度的增加近似呈线性递减趋势。

关键词: 聚脲涂覆钢板; 量纲分析; 位移; 爆炸荷载; 抗爆性能

中图分类号: O383.3 **文献标识码:** A

在当今世界的大环境下, 无论是民用领域还是军事领域, 爆炸冲击的防护都变得越来越重要。传统防护爆炸冲击的方法是提高单层金属防护介质的厚度, 但是单纯增加防护介质的厚度不仅会增加成本, 还会增加整个防护结构的重量, 降低装备的机动性。因此, 研究由多层材料所组成的防护结构具有非常重要的意义。聚脲弹性体作为一种新兴的聚合物材料, 具有良好的抗爆炸冲击性能, 被广泛应用在建筑和舰艇等大型防护结构中。美国海军陆战队研究部门通过研究后发现, 在军车底部喷涂聚脲可以在很大程度上减少爆炸冲击对人员和车辆的破坏[1]。宋彬等[2] 对比了聚脲弹性体夹层、无夹层和橡胶夹层 3 种防爆罐在相同质量炸药爆炸载荷作用下的抗爆性能, 发现聚脲弹性体夹层防爆罐的抗爆性能优于其他两种防爆罐。甘云丹等[3] 对比分析了单层钢板与聚脲涂覆钢板在水中爆炸下的抗爆性能, 发现聚脲弹性体可以明显提高钢板的抗爆能力。Bahei-El-Din 等[4] 发现, 在用纤维复合材料为夹层、泡沫为芯层的传统三明治结构中加入聚脲层可以提高其防护性能。Amini 等[5] 通过分析单位厚度的破坏能量后得出: 在钢板的背面涂覆聚脲时, 可以较明显地提高钢板的抗爆性能。赵鹏铎等[6]对不同涂覆方式下单钢板和箱体结构的抗爆性能进行了较详细的试验研究, 结果表明: 在等面密度条件下, 钢板迎爆面涂覆聚脲并不能提高其抗爆性能; 而在等钢板厚度条件下, 在单层钢板和箱体结构上涂覆聚脲能够提高其抗爆性能, 且聚脲涂覆在钢板背面时其抗爆性能更好。Tekalur 等[7]对由乙烯酯玻璃纤维、聚脲等材料组成的复合结构进行了抗爆性能研究, 结果表明相较于单一的乙烯酯玻璃纤维板, 聚脲涂层可以明显提高其抗爆性能, 且采用聚脲作为夹心层的三明治结构具有最好的抗爆性能。LeBlanc 等[8] 研究了聚脲层的厚度和位置对聚脲、E-Glass/Epoxy 复合结构防护性能的影响, 发现相对于聚脲涂覆在受冲击测, 聚脲涂覆在背侧更能大幅度提高防护结构的抗爆性能。Ackland 等[9]采用局部爆炸加载方法研究了相同面密度聚脲涂覆钢板复合结构的抗爆性能, 结果表明单一钢板结构的抗爆性能优于聚脲涂覆结构的抗爆性能。大多数学者的研究显示, 在等厚度钢板上涂覆聚脲层可以在一定程度上提高钢板的

* 收稿日期: 2018-10-15; 修回日期: 2018-12-02

作者简介: 王殿玺(1993—), 男, 硕士研究生, 主要从事多层结构防爆、抗侵彻研究.
E-mail: 17801118808@163.com

通信作者: 郭香华(1974—), 男, 博士, 副教授, 主要从事相场方法、装甲车防护研究.
E-mail: guoxh@bit.edu.cn

抗冲击性能，但是定量地研究爆心距、炸药质量以及涂覆聚脲厚度对聚脲涂覆钢板结构抗爆性能的响应规律还比较少。

本研究利用 LS-DYNA 有限元软件分析聚脲涂覆位置对钢板抗爆性能的影响，并结合量纲分析方法讨论爆心距、炸药质量、涂覆聚脲厚度对钢板抗爆性能的响应规律，以期为聚脲弹性体涂覆结构抗爆性能的评估与防护结构设计提供参考。

1　理论分析

聚脲涂覆钢板在爆炸载荷作用下的响应涉及多个物理量，可通过量纲分析方法得到各物理量之间的关系。图 1 为球形 TNT 炸药与聚脲涂覆钢板的相互作用示意。

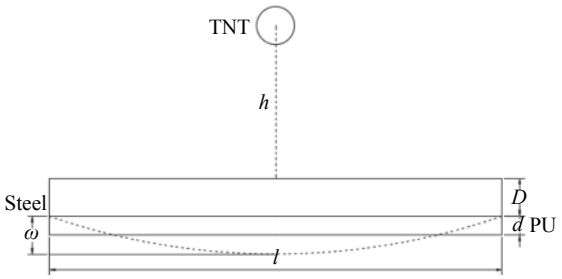


图 1　球形 TNT 与聚脲涂覆钢板

Fig. 1　Schematic of spherical TNT and polyurea coated steel plate

在没有发生断裂的情况下，钢板在爆炸载荷作用下的最大位移可作为其抗爆性能的重要指标之一，而决定最大位移 ω 的物理量包含以下几个方面。

(1)球形炸药的物理量参数，包括：炸药量 Q，装药密度 ρ_{e}、单位质量炸药所释放的化学能 E_{e}、爆轰产物的膨胀指数 γ_{e}。

(2)钢板的物理量参数，包括：密度 ρ_{s}、弹性模量 E_{s}、泊松比 v_{s}、屈服极限 σ_{s}、厚度 D、钢板尺寸 l。

(3)聚脲的物理量参数，包括：密度 ρ_{p}、弹性模量 E_{p}、泊松比 v_{p}、拉伸强度 σ_{p}、厚度 d、尺寸 l_{p}。

(4)钢板与聚脲之间的粘结力，包括：拉伸强度 σ、剪切强度 τ。

(5)空间几何参数：球形装药质心到靶板的垂直距离 h。

基于以上各物理量参数，钢板最大位移 ω 与各物理量之间的关系函数可写为

$$\omega = f(Q,\rho_{\mathrm{e}},E_{\mathrm{e}},\gamma_{\mathrm{e}};\rho_{\mathrm{s}},E_{\mathrm{s}},v_{\mathrm{s}},\sigma_{\mathrm{s}},D,l;\rho_{\mathrm{p}},E_{\mathrm{p}},v_{\mathrm{p}},\sigma_{\mathrm{p}},d,l_{\mathrm{p}};\sigma,\tau;h) \tag{1}$$

取装药密度 ρ_{e}、单位质量炸药所释放的化学能 E_{e}、钢板厚度 D 作为基本量，(1)式可以化为

$$\frac{\omega}{D} = f\left(\frac{\sqrt[3]{Q/\rho_{\mathrm{e}}}}{D},\gamma_{\mathrm{e}};\frac{\rho_{\mathrm{s}}}{\rho_{\mathrm{e}}},\frac{E_{\mathrm{s}}}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}},v_{\mathrm{s}},\frac{\sigma_{\mathrm{s}}}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}},\frac{l}{D};\frac{\rho_{\mathrm{p}}}{\rho_{\mathrm{e}}},\frac{E_{\mathrm{p}}}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}},v_{\mathrm{p}},\frac{\sigma_{\mathrm{p}}}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}},\frac{d}{D},\frac{l_{\mathrm{p}}}{D};\frac{\sigma}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}},\frac{\tau}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}};\frac{h}{D}\right) \tag{2}$$

如果保持钢板、聚脲和炸药的材料性质以及钢板的几何尺寸不变，即

$$(\rho_{\mathrm{e}},E_{\mathrm{e}},\gamma_{\mathrm{e}};\rho_{\mathrm{s}},E_{\mathrm{s}},v_{\mathrm{s}},\sigma_{\mathrm{s}},D,l;\rho_{\mathrm{p}},E_{\mathrm{p}},v_{\mathrm{p}},\sigma_{\mathrm{p}}) = \mathrm{const} \tag{3}$$

(1) 式就能变为更简单的无量纲关系式

$$\frac{\omega}{D} = f\left(\frac{\sqrt[3]{Q/\rho_{\mathrm{e}}}}{D};\frac{d}{D},\frac{l_{\mathrm{p}}}{D};\frac{\sigma}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}},\frac{\tau}{\rho_{\mathrm{e}}E_{\mathrm{e}}};\frac{h}{D}\right) \tag{4}$$

当保持聚脲的几何尺寸及厚度、钢板与聚脲之间的粘结力、炸高不变时，(4) 式化为简单的无量纲关系

$$\frac{\omega}{D} = f_1\left(\frac{\sqrt[3]{Q/\rho_{\mathrm{e}}}}{D}\right) \tag{5}$$

当保持聚脲的尺寸及厚度、钢板与聚脲之间的粘结力、炸药量不变时，(4) 式可变为简单的无量纲关系，即

$$\frac{\omega}{D} = f_2\left(\frac{h}{D}\right) \tag{6}$$

当保持聚脲涂层的尺寸 l_{p}、钢板与聚脲之间的粘结力、炸药量、炸高不变时，(4) 式可化为

$$\frac{\omega}{D} = f_3\left(\frac{d}{D}\right) \tag{7}$$

上面几个式子表明, 当保持钢板与聚脲之间的粘结力不变时, 钢板的最大位移只和炸高、炸药质量、聚脲涂层厚度有关, 具体的无量纲关系式可通过试验或数值模拟确定。下面将用一系列数值仿真来确定相关函数关系。

2　有限元计算模型

2.1　仿真建模及验证

为了验证所用模拟方法的有效性, 基于 LS-DYNA 有限元软件对文献 [6] 中爆炸载荷作用下聚脲涂覆钢板的试验结果进行仿真分析。试验中聚脲涂覆底材为边长 400 mm 的方形 Q235A 钢板, 板厚 1.2 mm, 钢板迎爆面涂覆 6 mm 厚聚脲层。聚脲涂覆钢板结构固定在两个夹板之间, 40 g 柱形炸药在 50 mm 爆心距下对聚脲涂覆钢板的加载区域为 250 mm×250 mm, 更详细的试验方案见文献 [6]。

在数值模拟建模中, 由于爆炸载荷和聚脲涂覆钢板结构具有对称性, 所以只建立 1/4 模型, 并且在模型的边界处施加固支约束和对称约束。试验中聚脲涂覆钢板的变形区域为 250 mm×250 mm, 为了节省计算时间, 分析时只考虑聚脲涂覆钢板的实际变形区域。钢板、聚脲层用 Lagrange 网格离散, 聚脲层采 8 节点实体单元 SOLID164, 而钢板采用壳单元的建模方式。聚脲涂覆钢板与炸药的有限元模型及尺寸如图 2 所示。

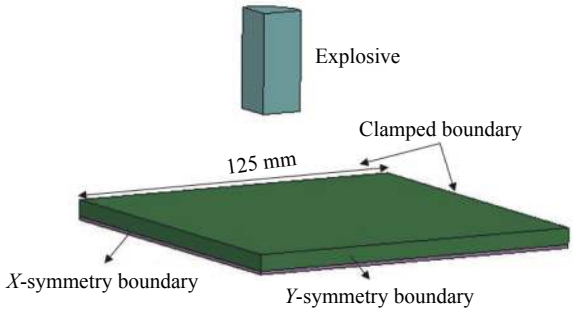


图 2　聚脲涂覆钢板结构与炸药模型

Fig. 2　Schematic of polyurea-coated structure and explosive

Q235A 钢采用动力学塑性本构模型(*MAT_PLASTIC_KINEMATIC)。由于聚脲是一种超黏弹性体, 具有很明显的应变率效应, 故采用 6 参数的 Mooney-Rivlin 模型[10], 具体的材料参数列于表 1。

表 1　聚脲弹性体材料参数[6]

Table 1　Parameters of polyurea elastomer material[6]

Density/(kg·m^{-3})	Tensile strength/MPa	Elongation at break/%	Tear strength/(kN·m^{-1})	Shore hardness (HA)
1020	24	400	85	85–95

用关键字*CONTACT_AUTOMATIC_SURFACE_TO_SURFACE_TIEBREAK[11] 定义钢板与聚脲层之间的黏结力, 设置两种材料之间的黏结强度。计算中当钢板与聚脲界面上的应力大于它们之间的黏结强度时, 钢板与聚脲发生分层破坏。

图 3 给出文献 [6] 中工况 3 的靶板变形情况, 图 4 为相应的数值模拟位移云图。可见, 中心处最大位移的试验结果与仿真结果吻合得非常好, 验证了本研究所采用模型的有效性。

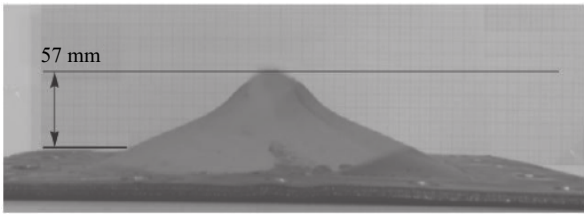


图 3　试验中聚脲涂覆钢板的变形[6]

Fig. 3　Deformation of polyurea coated steel plate in test[6]

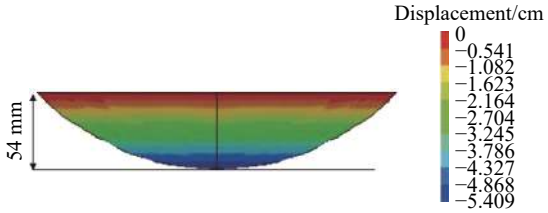


图 4　数值模拟中聚脲涂覆钢板的变形

Fig. 4　Deformation of polyurea coated steel plate in simulation

2.2　计算模型

首先对聚脲与钢板组成的具有相同面密度的单一钢板结构、正面涂层、背面涂层和正背面均有涂

层 4 种结构在爆炸载荷作用下的动态响应进行分析，并从钢板的最大位移、塑性应变两个角度分析不同结构的抗爆性能，具体结构设计方案见表 2。复合结构的尺寸均为 800 mm×800 mm（方形板），钢板厚度为 3 mm，聚脲涂层的厚度为 4 mm，球形炸药位于方形板中心位置的正上方，炸高为 200 mm。

表 2　结构设计方案

Table 2　Structural design schemes

Condition number	Structural diagram	Steel plate thickness/mm	Polyurea thickness/mm	TNT dose/kg	Detonation distance/mm
A1	Contrast condition	3	0	1	200
A2	Single steel plate	3.52	0	1	200
A3	Front coating	3	4	1	200
A4	Back coating	3	4	1	200
A5	Double sided coating	3	2+2	1	200

Note: ▬ Q235A steel plate; ▭ Polyurea.

钢板为 Q235A 钢，采用动力学塑性本构模型（*MAT_PLASTIC_KINEMATIC），强化方式为随动强化，并且考虑材料的应变率效应，其屈服应力放大系数的计算公式为

$$\frac{\sigma_{\mathrm{d}}}{\sigma_{\mathrm{Y}}}=1+\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{C}\right)^{\frac{1}{P}} \tag{8}$$

式中：σ_{Y} 为屈服应力，σ_{d} 为动态屈服应力，$\dot{\varepsilon}$为应变率，P 和 C 为材料应变率效应常数。Q235A 钢的具体参数见表 3。

表 3　Q235A 钢材料参数[12]

Table 3　Parameters of Q235A steel material[12]

Density/(kg·m^{-3})	Young's modulus/GPa	Poisson's ratio	σ_{Y}/MPa	Tangent modulus/GPa	C/s^{-1}	P
7850	210	0.3	240	2	10^5	5

2.3　复合结构抗爆性分析

上述 5 种防护结构在相同当量爆炸载荷作用下的变形情况如图 5 所示。球形炸药位于防护结构中心位置的正上方，所以钢板中心区域的位移最大。为了更好地对比钢板的最大位移和塑性变形情况，提取钢板中心区域单元的位移、塑性应变随时间的变化，如图 6、图 7 所示。

由图 6、图 7 可知，纯钢板、无涂覆层的 A1 工况中的钢板变形大于其余工况，且 A3>A5>A4>A2，A3、A5、A4、A2 工况中钢板的最大变形分别比 A1 减小了 7.0、7.7、7.9、14.0 mm。比较钢板中心区域的最大塑性应变得到，A1>A3>A5>A4>A2，且 A3、A5、A4、A2 工况中钢板的最大塑性应变分别比 A1 减小了 11.2%、12.4%、15.5%、16.9%。这说明在等厚度钢板上涂覆一定厚度的聚脲材料能够提高钢板的抗爆性能，并且聚脲涂覆在钢板背爆面的抗爆效果优于其他两种方式的涂覆。背面涂层结构受到爆炸冲击时，聚脲层的变形、破裂等弥散了较多冲击能量，从而减小钢板的变形；而当聚脲涂覆在迎爆面时，聚脲层首先受到爆炸冲击，聚脲层与钢板发生大面积的分层现象，且聚脲层发生撕裂脱落，从而在一定程度上减弱了爆炸冲击对钢板的作用：这两种涂覆方式都对爆炸冲击能量有一定的耗散作用，只是两者相比，背面涂覆方式更好。在等面密度条件下（A2～A5），纯钢板结构比聚脲涂覆钢板复合结构的抗爆性能更好，说明聚脲更应该涂覆在已有结构表面而不是用于设计等面密度的复合结构。

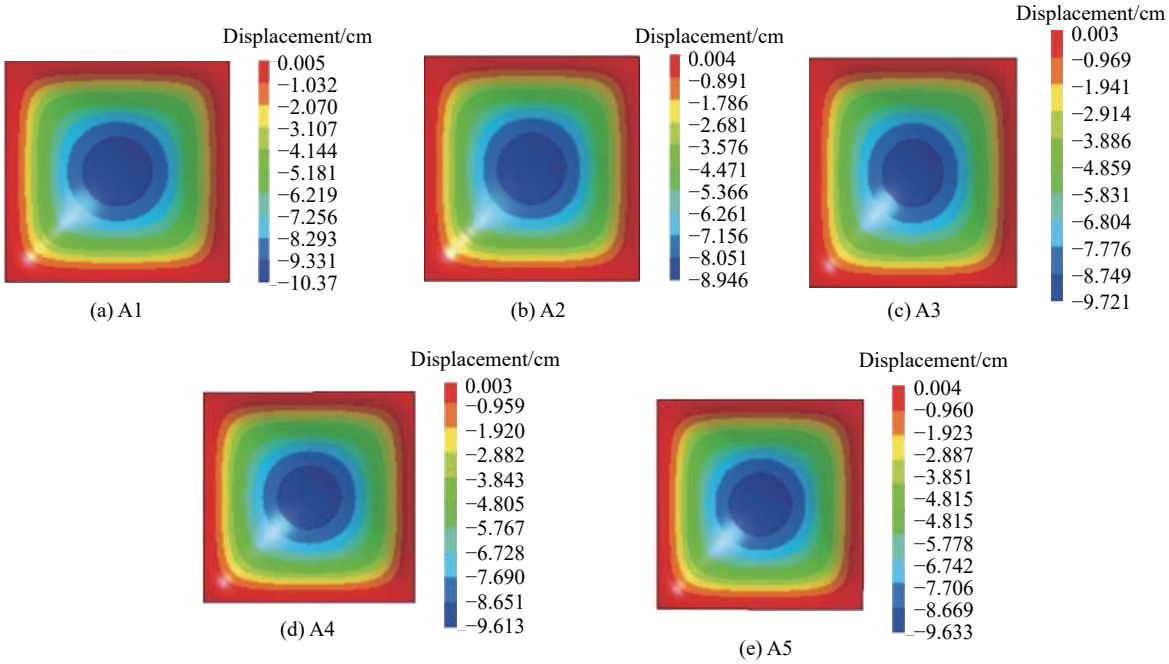


图 5　不同工况中钢板的位移云图

Fig. 5　Displacement cloud chart of steel plate in different working conditions

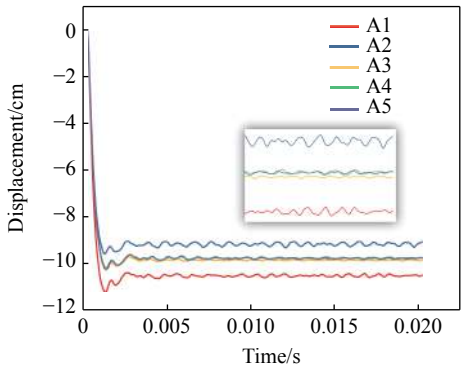


图 6　钢板最大变形处的位移时程曲线

Fig. 6　Displacement-time curves at maximum deflections of steel plates

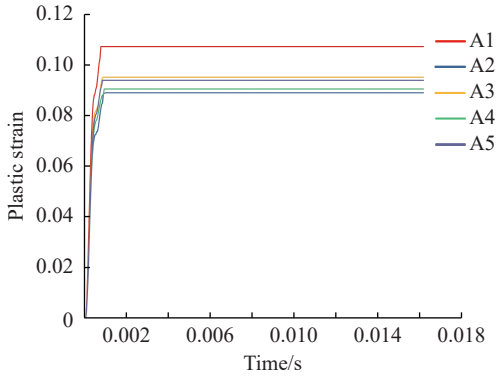


图 7　钢板最大变形处的塑性应变时程曲线

Fig. 7　Plastic strain-time curves at maximum deflections of steel plates

3　聚脲涂覆钢板最大位移的影响参数分析

由 2.3 节可知, 在等厚度钢板上涂覆一定厚度的聚脲层能够提高钢板的抗爆性能, 且聚脲涂覆在钢板背面的方式更好。本节以 A4 工况为例, 用量纲方法分析爆心距、炸药质量、聚脲层厚度对聚脲涂覆钢板变形的影响。

3.1　爆心距对聚脲涂覆钢板最大位移的影响

保持炸药质量、聚脲层厚度不变, 改变球形炸药质心距钢板中心位置的距离 (0.2～0.8 m)。首先对得到的钢板中心区域最大位移数据进行无量纲化, 再用指数函数对无量纲数据进行拟合, 得到如图 8 所示的无量纲化关系曲线。

从图 8 中可以看出, 在保持其他变量不变的条件下, 随着炸药质心与钢板之间距离的增加, 钢板的最大位移近似呈指数形式递减, 拟合关系式为$\omega/D = 2.55 + 40.3\mathrm{e}^{-0.005h/D}$。由球形炸药在无限空气介质中爆炸的超压、比冲量经验公式可知, 当保持炸药质量不变时, 随着爆心距的增加, 结构受到的超压峰值

和冲量下降，爆炸载荷传递到结构上的能量也随之减少，因此聚脲涂覆钢板的最大变形量随爆心距的增加而近似呈指数形式递减。

3.2　炸药质量对聚脲涂覆钢板最大位移的影响

同样以 A4 工况为例，保持涂层聚脲厚度和炸高不变，改变炸药的质量，分析炸药质量对聚脲涂覆钢板最大位移的影响规律。和 3.1 节一样，首先对得到的聚脲涂覆钢板最大位移数据进行无量纲化，再用线性函数拟合无量纲数据，得到如图 9 所示的关系曲线。

从图 9 中可以看出，在保持其他变量不变的情况下，随着球形炸药质量的增加，钢板中心区域的最大位移近似呈线性增加趋势，拟合线性关系式为$\omega/D=2.33\sqrt[3]{\dfrac{Q}{\rho_e D^3}}-32.75$。同样从球形炸药在无限空气介质中爆炸的超压、比冲量经验公式可知，当保持爆心距不变时，随着炸药质量的增加，爆炸载荷作用在结构上的超压和比冲量增大，传递到复合结构上的能量也随之增加，因此聚脲涂覆钢板的最大位移随炸药质量的增加近似呈线性增长趋势。

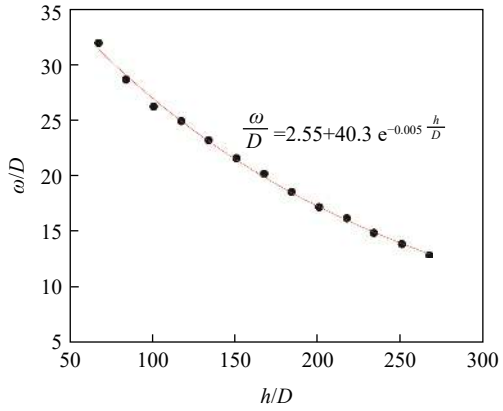


图 8　爆心距对聚脲涂覆钢板最大位移的影响

Fig. 8　Relationship between the detonation distance and the maximum displacement of polyurea coated steel plate

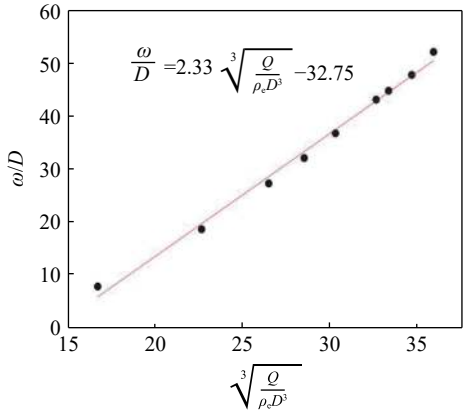


图 9　炸药质量对聚脲涂覆钢板最大位移的影响

Fig. 9　Relationship between the mass of explosive and the maximum displacement of polyurea coated steel plate

3.3　聚脲厚度对聚脲涂覆钢板最大位移的影响

保持炸药质量、炸高不变，改变涂覆在钢板背面的聚脲层的厚度。同样对该条件下得到的所有钢板的最大位移数据进行无量纲化，用线性函数对无量纲数据进行拟合，得到如图 10 所示的关系曲线。

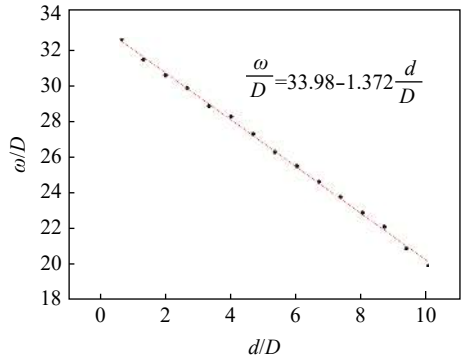


图 10　聚脲层厚度对聚脲涂覆钢板最大位移的影响

Fig. 10　Relationship between the thickness of polyurea layer and the maximum displacement of polyurea coated steel plate

从图 10 中可以看出，在保持其他变量不变的情况下，随着涂覆在钢板背面聚脲层厚度的增加，钢板的最大位移近似呈线性减小趋势，拟合关系式为$\omega/D=33.98-1.372(d/D)$。钢板的最大变形随着涂覆聚脲层厚度的增加而减小的主要原因是：增加聚脲层厚度在一定程度上增加了结构的刚度，从而整体上提高了结构的抗爆性能；将聚脲涂覆在背面时，由于聚脲材料的黏弹性特性，复合结构在受到爆炸冲击后，一部分以破裂碎片动能的形式带走大量冲击能量，一部分能量被聚脲层弥散和吸收，且聚脲层越厚，其破裂的程度越严重，破片的数量越多，以动能形式耗散的能量越大，所以聚脲层越厚，其吸收和弥散的能量越多。

4　结　论

通过数值仿真分析了聚脲涂覆方式对钢板抗爆性的影响，结合量纲分析方法讨论了爆心距、炸药质量、涂覆聚脲厚度对钢板中心最大位移的影响，得到以下结论：

(1)在等厚度钢板上涂覆聚脲能够提高钢板整体的抗爆性能，且聚脲涂覆在钢板背爆面的效果优于其他两种方式，而在等面密度条件下，纯钢板结构比聚脲涂覆钢板复合结构的抗爆性能更好；

(2)在保持其他变量不变的情况下，随着爆心距的增大，聚脲涂覆钢板的最大位移近似呈指数形式递减；

(3)改变炸药质量，聚脲涂覆钢板的最大位移近似随着炸药质量的增加而呈线性增加；

(4)改变涂覆在钢板背爆面的聚脲厚度，其他条件保持不变，则聚脲涂覆钢板的最大位移随着涂层厚度的增加近似呈线性递减趋势。

参考文献：

[1] MATHEWS W. Services test spray-on vehicle armor [N]. Army Times, 2004–05–03.

[2] 宋彬, 黄正祥, 翟文, 等. 聚脲弹性体夹芯防爆罐抗爆性能研究 [J]. 振动与冲击, 2016(7): 138–144.
SONG B, HUANG Z X, ZHAI W, et al. Anti-detonation properties of explosion-proof pots made of sandwich structures with polyurea elastomer [J]. Journal of Vibration and Shock, 2016(7): 138–144.

[3] 甘云丹, 宋力, 杨黎明. 弹性体涂覆钢板抗冲击性能的数值模拟 [J]. 兵工学报, 2016(S2): 15–18.
GAN Y D, SONG L, YANG L M. Numerical simulation for anti-blast performances of steel plate coated with elastomer [J]. Acta Armamentarii, 2016(S2): 15–18.

[4] BAHEI-EI-DIN Y A, DVORAK G J, FREDRICKSEN O J. A blast-tolerant sandwich plate design with a polyurea interlayer [J]. International Journal of Solids and Structures, 2006, 43(25/26): 7644–7658.

[5] AMINI M R, SIMON J, NEMAT-NASSER S. Numerical modeling of effect of polyurea on response of steel plates to impulsive loads in direct pressure-pulse experiments [J]. Mechanics of Materials, 2010, 42(6): 628–639.

[6] 赵鹏铎, 张鹏, 张磊, 等. 聚脲涂覆钢板结构抗爆性能试验研究 [J]. 北京理工大学学报, 2018, 38(2): 118–123.
ZHAO P D, ZHANG P, ZHANG L, et al. Experimental investigation on the performance of polyurea-coated structure under blast loads [J]. Transactions of Beijing Institute of Technology, 2018, 38(2): 118–123.

[7] TEKALUR S A, SHUKLA A, SHIVAKUMAR K. Blast resistance of polyurea based layered composite materials [J]. Composite Structures, 2008, 84(3): 271–281.

[8] LEBLANC J, SHUKLA A. Response of polyurea-coated flat composite plates to underwater explosive loading [J]. Journal of Composite Materials, 2015, 49(8): 965–980.

[9] ACKLAND K, ANDERSON C, NGO T D. Deformation of polyurea-coated steel plates under localised blast loading [J]. International Journal of Impact Engineering, 2013, 51: 13–22.

[10] XUE L, MOCK W, BELYTSCHKO T. Penetration of DH-36 steel plates with and without polyurea coating [J]. Mechanics of Materials, 2010, 42(11): 981–1003.

[11] HALLQUIST J O. LS-DYNA keyword user's manual [M]. Livermore Software Technology Corporation, 2007.

[12] LIU X R, TIAN X G, LU T J, et al. Blast resistance of sandwich-walled hollow cylinders with graded metallic foam cores [J]. Composite Structures, 2012, 94(8): 2485–2493.

Dynamic Response of Polyurea Coated Steel Plate under Blast Loading

WANG Dianxi, GUO Xianghua, ZHANG Qingming

（*School of Mechatronical Engineering*, *Beijing Institute of Technology*, *Beijing* 100081, *China*）

Abstract: The dynamic response of the equivalent areal density polyurea-coated steel plate and a single steel plate under air blast loads is simulated by using the finite element software LS-DYNA after the validity of this method is demonstrated. The influence of polyurea coating position on its antiknock ability is analyzed; Besides, the method of dimension analysis is employed to study the response of the distance between explosive and steel plate, spherical charge's quality, and the polyurea layer thickness on the deformation of steel plates based on the prior study. The results show that the position of polyurea coated on steel plate affects its antiknock performance. When other variables are assumed to be constant, the maximum displacement of the center of the steel plate exponentially decreased with the increase of the distance between the distance between explosive and steel plate; Moreover, when the quality of the explosive is changed, the maximum displacement of the steel plate increases linearly with the increase of the explosive mass; Also, when the thickness of the coated polyurea is changed, the maximum displacement of the steel sheet decreases linearly with the increase of the thickness of the coating.

Keywords: polyurea coated steel plate; dimensional analysis; displacement; blast load; antiknock ability

DOI: 10.11858/gywlxb.20180534

基于 Lagrangian 分析法的梯度泡沫金属动态力学行为研究

荣 誉, 刘志芳, 李世强, 王志华

(太原理工大学应用力学与生物医学工程研究所, 山西 太原 030024)

摘要: 采用 Lagrangian 分析法, 对梯度泡沫金属在高速冲击下的变形机理和应力响应进行研究。基于 3D-Voronoi 技术, 构建了 5 种不同密度梯度的泡沫金属细观有限元模型, 并进行了高速冲击下的 Taylor 数值实验, 得到不同密度梯度泡沫金属的质点速度分布规律。采用 Lagrangian 分析法并结合数值实验结果, 研究了高速冲击下密度梯度参数对泡沫金属的局部应变分布、应力分布以及冲击波传播与衰减规律的影响。结果表明: 负密度梯度泡沫金属比正密度梯度泡沫金属具有更强的抵抗变形能力, 且密度梯度参数越小, 变形程度越小; 负密度梯度泡沫金属的局部压实应力呈线性减小, 最大局部压实应力随着密度梯度参数的减小而增大, 在冲击端附近可以承受更大的载荷; 正密度梯度泡沫金属的局部压实应力分布呈平台状, 其最大局部压实应力小于负密度梯度泡沫金属。

关键词: Lagrangian 分析法; 梯度泡沫金属; 3D-Voronoi 技术; 密度梯度参数

中图分类号: O347.4; O521.2 **文献标识码:** A

超轻泡沫金属凭借其优异的抗冲击、抗爆炸性能被广泛用于吸能装置和抗爆牺牲层的芯层, 因而其动态力学行为受到众多研究者的关注[1-2]。已有研究主要集中于泡沫金属在动态冲击下的变形模式、临界冲击速度、冲击波分析模型、应力-应变状态点等, 其中应力增强和变形局部化是两个最典型的动态特征。

研究材料的动态力学行为时, 应考虑应变率效应与惯性效应的耦合问题[3]。分离式霍普金森压杆(Split Hopkinson Pressure Bar, SHPB)技术是经典的解耦方法, 然而由于泡沫金属在高速冲击下出现变形局部化现象, 导致其无法满足应力沿试件长度方向均匀分布的假设[4-5]。为此, 人们提出了波传播法的解耦方法, 该方法是根据试件中波传播信息反推材料的动态本构关系, 无需任何假设。Lagrangian 分析法是基于波传播理论的一种方法, 其基本思想是通过测量材料不同 Lagrangian 位置处所需的物理量, 由质量和动量守恒方程反推材料的动态本构关系。Fowles[6]、Grady[7]、Seaman[8]、Gupta[9]、Forest 等[10]分别提出了相速度的概念、路径法、曲面拟合法、自洽检验法和冲量时间积分函数法。王礼立等[11]和朱珏[12]将 Lagrangian 分析法与 SHPB 实验技术相结合, 提出了基于路线法的"1sV+nV"和"1sV+$n\varepsilon$"Lagrangian 分析法, 由此研究了混凝土材料的动态力学行为, 得到了混凝土在高速加载下的应力-应变曲线。对于某些特殊材料, 由于边界处测得的速度和应力信息失真, 王礼立等[13]又提出了一种基于路径线法的"nV+T_0"Lagrangian 分析法, 得到了均匀泡沫铝在中等冲击速度下的应力-应变曲线。由于 3D-Voronoi 模型可以更加真实地反映泡沫内部结构, Ding 等[14]基于 Taylor 数值实验提出了一种无需划分路径线的"1sV+nV"Lagrangian 分析法, 得到了均匀泡沫铝的动态应力-应变曲线。基于 Lagrangian 分析法研究均匀泡沫金属的动态力学行为已取得了一些成果, 然而关于梯度泡沫金属动态力学行为的研究并不完

* **收稿日期:** 2018-04-03; **修回日期:** 2018-05-29

基金项目: 国家自然科学基金(11572214, 11772216, 11602161)

作者简介: 荣 誉(1993—), 男, 硕士研究生, 主要从事冲击动力学研究. E-mail: rongyu230@qq.com

通信作者: 王志华(1977—), 男, 博士, 教授, 主要从事冲击动力学研究. E-mail: wangzh@tyut.edu.cn

善，强动载荷下梯度泡沫金属的变形机理并不清楚，应力波的传播和衰减规律有待进一步完善。

本研究拟采用“1*sV*+*nV*”Lagrangian 分析法研究梯度泡沫金属的动态力学行为。首先通过 3D-Voronoi 技术构建连续梯度泡沫金属有限元模型；然后结合 Taylor 数值实验和 Lagrangian 分析法的基本理论，分析当泡沫金属以 250 m/s 的速度撞击刚性墙时，泡沫金属的密度梯度参数对其质点速度、局部应变和应力的影响；最后探讨冲击波速度在梯度泡沫金属中的衰减规律，分析梯度泡沫金属中局部压实应变、局部压实应力和压实应变随冲击波传播的变化规律，讨论这些物理量与密度梯度参数之间的关系。

1　Lagrangian 分析法

在一维平面应力波传播理论中，Lagrangian 分析法主要基于质量守恒方程和动量守恒方程，忽略热传导、体积力和内部能量的影响[14]，则这两个方程可以表示为

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t}=-\frac{\partial v}{\partial X} \tag{1}$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial X}=-\rho_0(X)\frac{\partial v}{\partial t} \tag{2}$$

式中：ε、σ、v 分别为应变、应力和质点速度，X 为拉格朗日坐标，t 为时间，$\rho_0(X)$ 为梯度泡沫金属的初始密度。规定试件受压缩时的应变和应力为正，受拉伸时为负。

采用“1*sV*+*nV*” Lagrangian 分析法[14]，应变分布和应力分布可以通过(1)式和(2)式结合中心差分法直接写成相应的差分形式，即

$$\varepsilon_{i,j+1}-\varepsilon_{i,j}=-\frac{1}{2}\left(\frac{v_{i+1,j}-v_{i,j}}{X_{i+1}-X_i}+\frac{v_{i,j}-v_{i-1,j}}{X_i-X_{i-1}}\right)(t_{j+1}-t_j) \tag{3}$$

$$\sigma_{i+1,j}-\sigma_{i,j}=-\frac{1}{2}\rho_0(X_i)\left(\frac{v_{i,j+1}-v_{i,j}}{t_{j+1}-t_j}+\frac{v_{i,j}-v_{i,j-1}}{t_j-t_{j-1}}\right)(X_{i+1}-X_i) \tag{4}$$

根据 Taylor 数值实验，提取所有单元节点处的速度时程曲线，同时在一维应力波传播理论中，自由端处的应力始终为零。因此，采用(3)式和(4)式，结合零边界条件和初始条件($\sigma(0,t)=0$; $\varepsilon(X,0)=0$; $\sigma(X,0)=0$)，可以直接得到应变时程曲线和应力时程曲线。

2　有限元模型

2.1　连续梯度 3D-Voronoi 模型

规则的正十四面体胞元由 8 个六角形面和 6 个正方形面组成。假设每个正十四面体胞元的胞壁边长为 l，胞壁厚度为 h，则每个胞元的相对密度 R_0 可以表示为

$$R_0=\frac{(12\sqrt{3}l^2+6l^2)\cdot h}{16\sqrt{2}l^3}=\frac{(6\sqrt{3}+3)h}{8\sqrt{2}l} \tag{5}$$

由(5)式可以看出，泡沫的相对密度与胞壁边长及胞壁厚度有关，因此可以通过改变胞壁尺寸和胞元壁厚研究梯度泡沫的动态力学行为。采用张建军[15]提出的改变胞元尺寸的方法构建连续梯度 3D-Voronoi 模型，该方法通过控制局部胞元数量调节局部胞元尺寸，从而控制泡沫的相对密度分布。假设泡沫试件在 X 方向上的密度是线性分布的，则连续梯度泡沫的密度分布在 Lagrangian 坐标下为

$$\rho(X)=\rho_{\mathrm{ave}}\left[1+\gamma\left(\frac{X}{L}-\frac{1}{2}\right)\right] \tag{6}$$

式中：γ、ρ_{ave} 和 L 分别为密度梯度参数、平均密度和试件长度。将试件沿梯度方向平均分成 η 部分，则每部分的胞元数量为

$$N_\eta=\frac{(8\sqrt{2})^2A_{\mathrm{c}}\rho_{\mathrm{ave}}^3}{(6\sqrt{3}+3)^3h^3}\int_a^b\left[1+\gamma\left(\frac{X}{L}-\frac{1}{2}\right)\right]^3\mathrm{d}X \tag{7}$$

式中：A_{c} 为试件横截面的面积，$0\leqslant a<b\leqslant L$。试件中的胞元总数量 N 通过将 $a=0$ 和 $b=L$ 代入而得到。

当 γ=0 时, 可以得到均匀泡沫中的胞元数量为

$$N_{\gamma=0}=\frac{\left(8\sqrt{2}\right)^2 A_c\rho_{ave}^3 L}{\left(6\sqrt{3}+3\right)^3 h^3} \tag{8}$$

因此可以通过控制局部胞元数量调节泡沫的相对密度分布。为了验证连续梯度模型的相对密度分布情况, 计算每部分的相对密度 ρ_i, 即

$$\rho_i=\frac{A_i\cdot h}{A_c\cdot\Delta L} \tag{9}$$

式中: A_i 为第 i 部分的胞壁面积; $\Delta L=L/\eta$; η=1,2,3,4,5, η 取为 5[15]。

在 3D-Voronoi 模型的构建过程中, 根据任意两个相邻胞元形核点之间的距离必须大于形核点之间的最小距离 δ_{min} 的原则, 在第 η 区域内随机投放 N_η 个形核点, 其中 δ_{min} 表示为

$$\delta_{min}=(1-k)\delta_0 \tag{10}$$

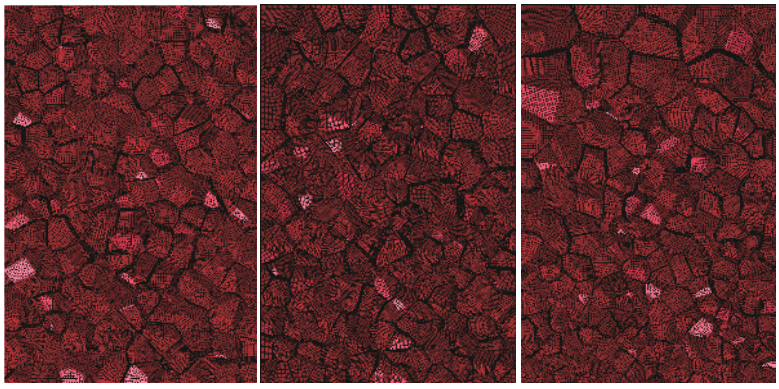
式中: k 为不规则度, δ_0 为 N_η 个正十四面体胞元中任意两个相邻形核点之间的距离。

$$\delta_0=\frac{\sqrt{6}}{2}\left(\frac{V_\eta}{\sqrt{2}N_\eta}\right)^{1/3} \tag{11}$$

式中: V_η 为泡沫试件中第 η 部分的体积。

2.2　Taylor 数值实验

由 2.1 节构建的具有均匀胞元壁厚的连续梯度泡沫有限元模型, 如图 1 所示, 当 γ=0 时为均匀泡沫有限元模型。假设有限元模型的平均密度 ρ_{ave}=400 kg/m^3, 尺寸为 40 mm×40 mm×60 mm, 胞元壁厚为 0.2 mm, 不规则度为 0.35, 由(9)式得到 γ=0、γ=0.4 和 γ=0.8 时有限元模型的胞元数分别为 2 073、2 155 和 2 409。模型中所有胞壁均定义为壳单元, 并采用双线性应变强化模型作为基体材料, 相关参数分别定义为: 基体材料密度 ρ_s=2 700 kg/m^3, 杨氏模量 E=69 GPa, 泊松比 ν=0.3, 屈服应力 σ_{ys}=76 MPa, 切线模量为 0.69 GPa。泡沫与刚性墙之间以及泡沫中相互接触表面之间的摩擦系数均为 0.02[16]。采用有限元软件 LS-DYNA 971/Explicit 进行数值模拟, 对网格敏感性进行研究, 壳单元的网格尺寸选取 0.4 mm。



(a) γ=0　　(b) γ=0.4　　(c) γ=0.8

图 1　梯度泡沫示意图

Fig. 1　Schematic diagrams of graded foam

采用 Taylor 数值实验研究梯度泡沫金属的动态力学行为。分析 5 种不同密度梯度的泡沫金属试件, 每个试件以 250 m/s(应变率约为 4 000 s^{-1})的初速度撞击固定的刚性墙, 其中 X 坐标建立在自由端处, 如图 2(a) 所示。对比(6)式得到的理论密度分布和有限元模型的实际密度分布(见图 2(b)), 可以看出: 当初始密度由冲击端向自由端增加时, 密度梯度参数为正, 反之为负, 且理论计算结果与实际分布吻合较好。图 3 给出了密度梯度参数 γ=–0.8 的泡沫金属在 Taylor 撞击过程中的变形图。

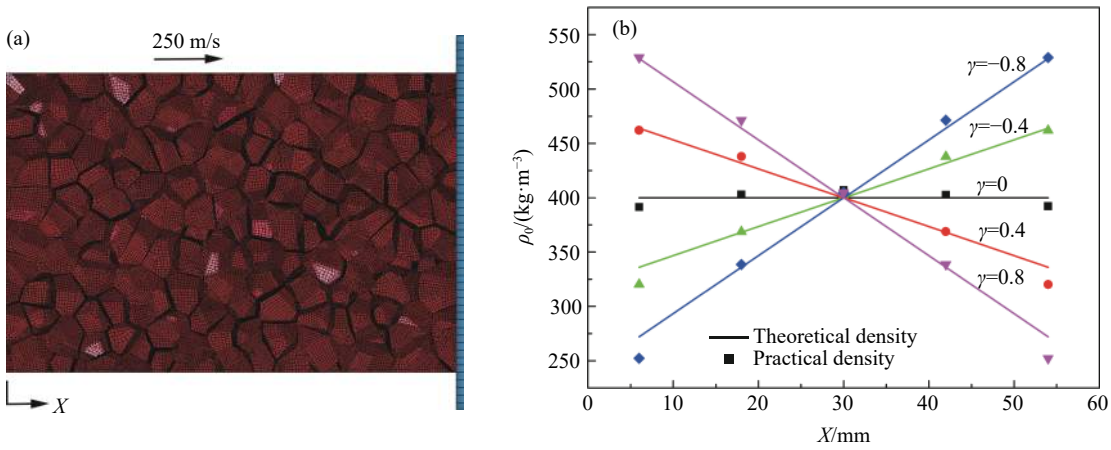


图 2　Taylor 数值实验 (a) 以及理论和实际密度分布 (b)

Fig. 2　Virtual Taylor impact test scenario (a) and theoretical and practical density distributions (b)

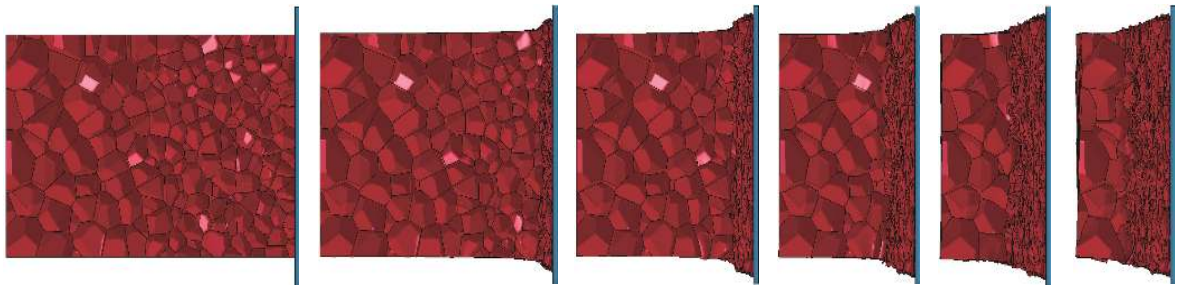


图 3　γ=−0.8 的泡沫金属在 Taylor 撞击过程中的变形

Fig. 3　Deformation of metallic foams with γ=−0.8 in the virtual Taylor impact test

3　结果与讨论

3.1　质点速度分布

为保证计算过程中速度分布的连续性，将原来 Lagrangian 位置点的速度用平均质点速度代替。图 4(a) 给出了 γ=−0.8 时的质点速度分布 v (X_i, t)，其他梯度泡沫金属的质点速度分布也与其基本相同。取其中

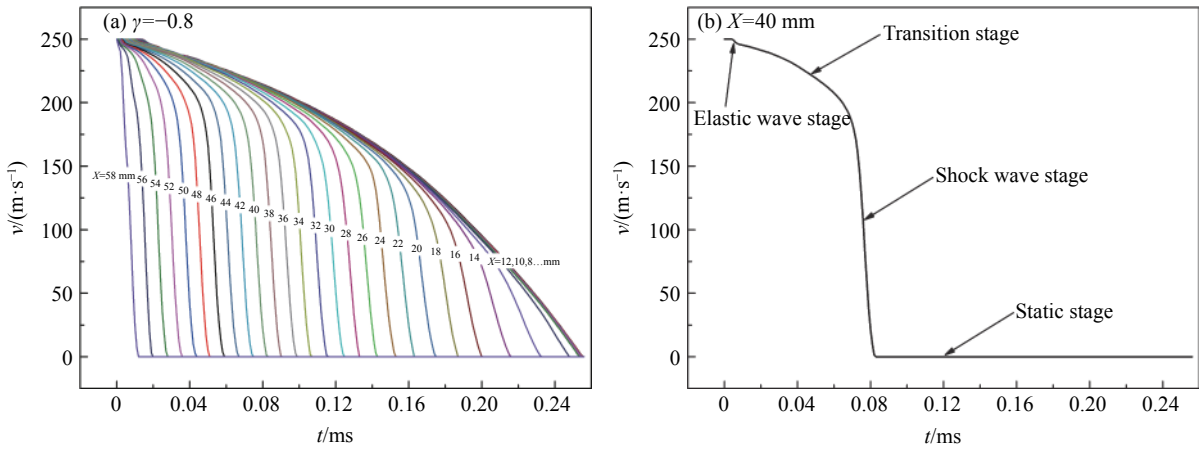


图 4　质点速度时程曲线 (a) 和 X=40 mm 处的速度时程曲线 (b)

Fig. 4　Time histories of particle velocity (a) and velocity at X=40 mm (b)

某一位置处的速度分布, 如图 4(b) 所示, 其变化趋势可大致分为 4 个不同运动阶段, 分别为弹性波作用段、过渡段、冲击波作用段和波后静止段。

根据同一时刻质点速度分布中最大速度梯度所对应的位置, 即冲击波阵面所在位置, 将其对时间 t 求导, 得到不同梯度泡沫金属的冲击波速 (D) 时程曲线, 如图 5 所示。从图 5 中可以看出, 在冲击开始阶段, 不同梯度泡沫金属的冲击波速相等, 约为 250 m/s。随着冲击波传播, 由于弹性波速远大于冲击波速, 当冲击波在试件中传播一次时, 弹性波已经在试件中传播多个来回, 因此在相继从自由端反射的弹性卸载波的持续作用下, 冲击波速逐渐减小, 其开始减小时刻随着密度梯度参数的增大而延后。冲击波速随着冲击波强度的减弱而逐渐减小, 说明冲击波强度随着冲击波传播逐渐减弱, 且开始减弱时刻随着密度梯度参数的减小而提前。

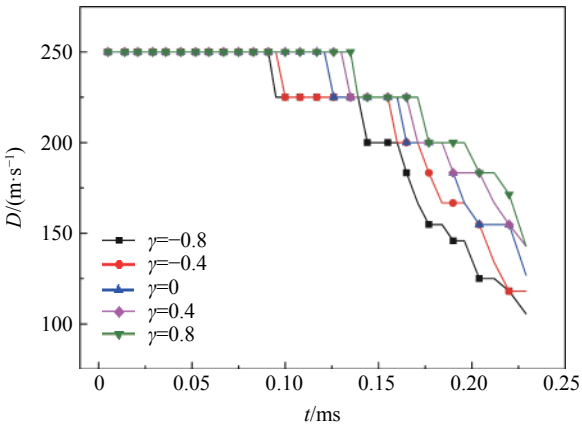


图 5　冲击波速时程曲线

Fig. 5　Time histories of shock-wave velocity

3.2　局部动态应变分布

图 6(a) 给出了 γ=0.8 时泡沫金属的局部动态应变分布 ε (X_i, t), 其他梯度泡沫金属的局部动态应变分布也与此基本相同。取其中某一位置处的动态应变分布, 如图 6(b) 所示, 其变化趋势大致分为 3 个阶段: 弹性阶段、冲击阶段和压实阶段。在冲击阶段, 局部动态应变在冲击波传过后从弹性应变迅速增加到压实应变, 反映了泡沫金属在冲击波作用下的局部压实程度。从图 6(a) 中可以看出, 压实现象在靠近冲击端尤为明显, 但远离冲击端时, 由于冲击波在弹性卸载波的作用下逐渐变弱直至消失, 局部压实应变随着距冲击端距离的增大而逐渐减小, 最终趋于零, 表明泡沫金属中冲击波在这些位置已经被完全卸载, 几乎未产生变形。

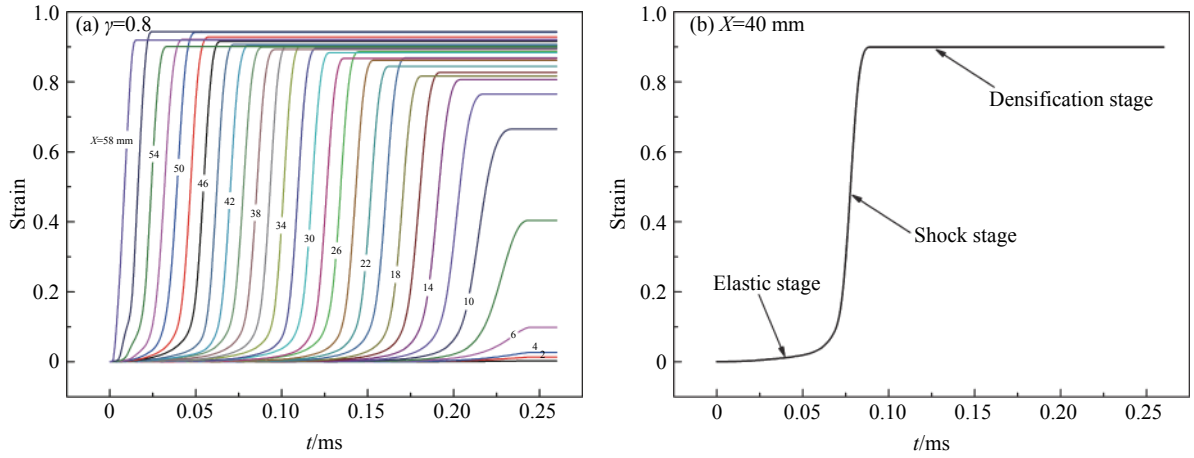


图 6　局部动态应变时程曲线 (a) 和 X=40 mm 的动态应变时程曲线 (b)

Fig. 6　Local dynamic strain-time curves (a) and time histories of dynamic strain at X=40 mm (b)

图 7 给出了 5 种密度梯度参数下泡沫金属的局部压实应变随 Lagrangian 位置 X 变化的关系。由图 7 可知, 均匀泡沫金属撞击刚性墙的局部压实应变略高于负密度梯度泡沫金属, 而略低于正密度梯度泡沫金属。表 1 列出了梯度泡沫金属的最大局部压实应变, 可见最大局部压实应变随着密度参数的减小而减小。随着冲击波的减弱, 局部压实应变开始减小, 泡沫金属局部不再被完全压实, 且密度梯度参数越小, 开始减小的位置距冲击端越近, 这是由于泡沫金属中冲击波强度开始减弱的时刻随着密度

梯度参数的减小而提前。

根据局部压实应变分布，冲击完成后泡沫金属的压实应变可以表示为

$$\varepsilon_{\mathrm{d}}=\frac{1}{L}\int_0^L \varepsilon_L(X)\mathrm{d}X \tag{12}$$

式中：$\varepsilon_L(X)$ 为 Lagrangian 位置 X 处的压实应变，梯度泡沫金属的压实应变如表 1 所示。从表 1 中可以看出，压实应变随着密度梯度参数的减小而减小，表明泡沫金属的压实程度也随着密度梯度参数的减小而减小。在 250 m/s 冲击速度下，负密度梯度泡沫金属比正密度梯度泡沫金属具有更强的抵抗变形能力，且密度梯度参数越小，变形程度越小。

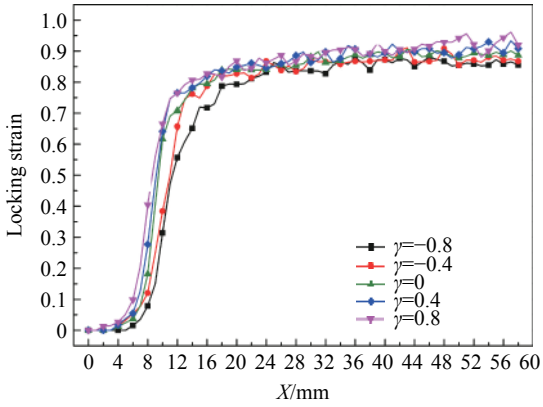


图 7　局部压实应变分布

Fig. 7　Local locking strain profiles

表 1　局部最大压实应变、压实应变、最大局部压实应力及其位置

Table 1　Maximum local locking strain, locking strain, and local maximum densification stress and its location

γ	Maximum local locking strain	Locking strain	Maximum local densification stress	
			Value/MPa	Lagrangian location/mm
–0.8	0.88	0.68	47.44	58
–0.4	0.91	0.70	39.72	56
0	0.92	0.72	34.77	58
0.4	0.93	0.74	30.08	35
0.8	0.96	0.76	30.75	37

3.3　局部动态应力分布

图 8(a)～图 8(c) 给出了 γ=–0.4、γ=0.4 和 γ=0 的局部动态应力分布 $\sigma(X_i, t)$，其他梯度泡沫金属的局部动态应力分布也与此基本相同。取 γ=0 中某一位置处的动态应力分布，如图 8(d) 所示，其变化趋势可以分为 3 个阶段：弹性阶段、冲击阶段和卸载阶段。当 Lagrangian 位置远离冲击端时，局部动态应力在塑性阶段迅速上升的特征逐渐消失，说明这些位置的冲击波被逐渐削弱直至完全被卸载，留下弹性加载波和卸载波相互作用，该现象在负密度梯度泡沫金属中更明显。

图 9 给出了 5 种密度梯度参数下泡沫金属的局部压实应力随 Lagrangian 位置变化的关系。结合图 8 和图 9 可以看出：均匀泡沫金属的局部压实应力随着冲击波的传播而逐渐减小，表明均匀泡沫金属在冲击过程中其冲击波强度逐渐减弱；负密度梯度泡沫金属的局部压实应力的变化趋势与均匀泡沫金属相同，且局部压实应力的下降梯度随着密度梯度参数的减小而增大；而正密度梯度泡沫金属的局部压实应力分布呈平台状，不同密度梯度参数下的平台应力基本相等。表 1 给出了梯度泡沫金属的最大局部压实应力及其所在位置。可见，均匀和负密度梯度泡沫金属的最大局部压实应力出现在冲击端，且随着密度梯度参数的减小而增大；而正密度梯度泡沫金属的最大局部压实应力则出现在试件中部附近，可以近似看成平台应力，随密度梯度参数的变化不明显。上述分析表明，在 250 m/s 冲击速度下，最大局部压实应力随着密度梯度参数的减小而增大，负密度梯度泡沫金属在冲击端附近可以承受更大的载荷；而正密度梯度泡沫金属的局部压实应力分布却呈现平台状，其最大局部压实应力小于负密度梯度泡沫金属，且随密度梯度参数的变化不明显。

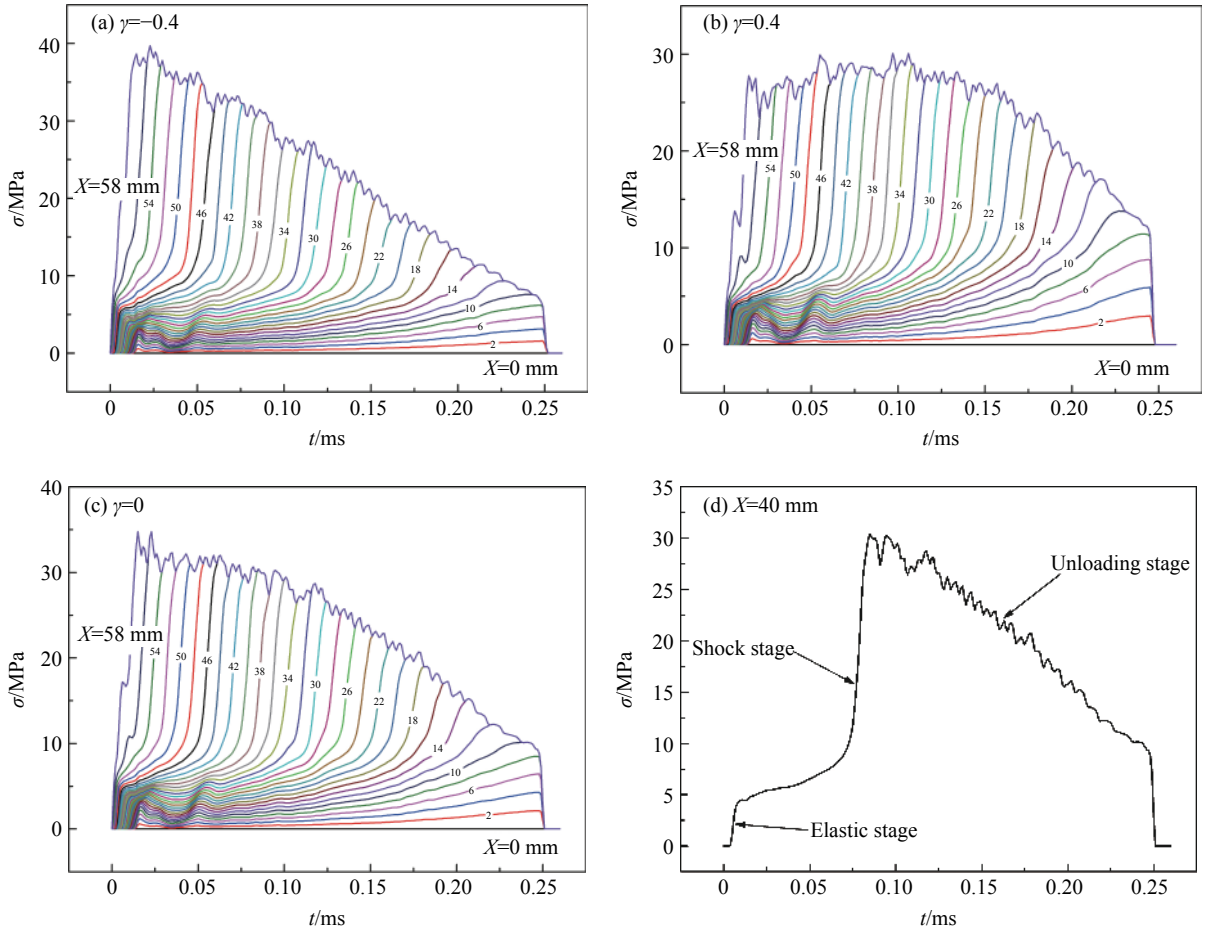


图 8　局部动态应力时程曲线 ((a) ~ (c)) 和 X=40 mm 处的动态应力时程曲线 (d)

Fig. 8　Local dynamic stress-time curves ((a)–(c)) and time histories of dynamic stress at X=40 mm (d)

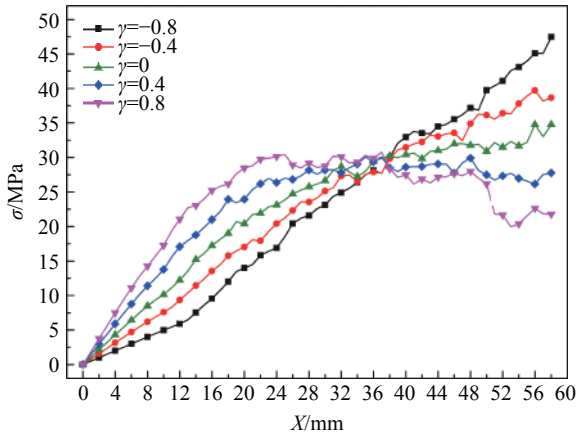


图 9　局部压实应力分布

Fig. 9　Local densification stress profiles

4　结　论

采用 3D-Voronoi 技术, 建立了 5 种密度梯度参数的泡沫金属细观有限元模型, 并进行了 Taylor 数值实验。基于“1sV+nV”Lagrangian 分析法, 结合 Taylor 数值实验结果, 研究了不同密度梯度泡沫金属在 250 m/s 冲击速度下的动态力学行为, 分析了密度梯度参数对泡沫金属试件局部应变、局部应力分布

以及应力波传播规律的影响，得到如下结论：

（1）冲击载荷作用下不同密度梯度泡沫金属中的冲击波速和冲击波强度分别随着冲击波传播而逐渐减小和减弱，且在负密度梯度泡沫金属中开始减小和减弱的时刻早于正密度梯度泡沫金属，密度梯度参数越小，该时刻越早；

（2）不同密度梯度泡沫金属的压实应变（即压实程度）随着密度梯度参数的减小而减小，负密度梯度泡沫金属比正密度梯度泡沫金属具有更强的抵抗变形能力，且密度梯度参数越小，变形程度越小；

（3）负密度梯度泡沫金属的局部压实应力分布呈线性减小，最大局部压实应力随着密度梯度参数的减小而增大，在冲击端附近可以承受更大的载荷；而正密度梯度泡沫金属的局部压实应力分布呈平台状，其最大局部压实应力小于负密度梯度泡沫金属，且随密度梯度参数的变化不明显。

参考文献：

[1] WANG S, DING Y, WANG C, et al. Dynamic material parameters of closed-cell foams under high-velocity impact [J]. International Journal of Impact Engineering, 2017, 99: 111–121.

[2] WANG P, WANG X, ZHENG Z, et al. Stress distribution in graded cellular materials under dynamic compression [J]. Latin American Journal of Solids and Structures, 2017, 14(7): 1251–1272.

[3] 王礼立. 应力波基础 [M]. 北京: 国防工业出版社, 2005.

[4] DESHPANDE V S, FLECK N A. High strain rate compressive behaviour of aluminium alloy foams [J]. International Journal of Impact Engineering, 2000, 24(3): 277–298.

[5] 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(11): 676.

[6] FOWLES R. Conservation relations for spherical and cylindrical stress waves [J]. Journal of Applied Physics, 1970, 41(6): 2740–2741.

[7] GRADY D E. Experimental analysis of spherical wave propagation [J]. Journal of Geophysical Research, 1973, 78(8): 1299–1307.

[8] SEAMAN L. Lagrangian analysis for multiple stress or velocity gages in attenuating waves [J]. Journal of Applied Physics, 1974, 45(10): 4303–4314.

[9] GUPTA Y M. High strain-rate shear deformation of a polyurethane elastomer subjected to impact loading [J]. Polymer Engineering & Science, 1984, 24(11): 851–861.

[10] FOREST C A, WACKERLE J, DICK J J, et al. Lagrangian analysis of MIV (Magnetic Impulse-Velocity) gauge experiments on PBX 9502 using the mass-displacement moment function: LA-UR-89-2898 [R]. Los Alamos: Los Alamos National Lab, 1989.

[11] WANG L, ZHU J, LAI H. A new method combining Lagrangian analysis with Hopkinson pressure bar technique [J]. Strain, 2011, 47(2): 173–182.

[12] 朱珏. 混凝土类材料冲击本构特性的 SHPB 技术及 Lagrange 反解法的研究 [D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2006.

[13] WANG L, DING Y, YANG L. Experimental investigation on dynamic constitutive behavior of aluminum foams by new inverse methods from wave propagation measurements [J]. International Journal of Impact Engineering, 2013, 62: 48–59.

[14] DING Y, WANG S, ZHENG Z, et al. Dynamic crushing of cellular materials: a unique dynamic stress–strain state curve [J]. Mechanics of Materials, 2016, 100: 219–231.

[15] 张建军. 冲击载荷下梯度多孔金属力学行为研究 [D]. 太原: 太原理工大学, 2016.

[16] ZHENG Z, WANG C, YU J, et al. Dynamic stress–strain states for metal foams using a 3D cellular model [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2014, 72: 93–114.

Dynamic Mechanical Behavior of Graded Metallic Foams Based on Lagrangian Analysis Method

RONG Yu, LIU Zhifang, LI Shiqiang, WANG Zhihua

（*Institute of Applied Mechanics and Biomedical Engineering*, *Taiyuan University of Technology*, *Taiyuan* 030024, *China*）

Abstract: The Lagrangian analysis method was employed to investigate the deformation mechanism and stress response of graded metallic foams. The mesoscopic finite element models of the graded metallic foams with five different density gradient parameters were constructed by the 3D-Voronoi technique, and the corresponding Taylor numerical tests were performed under high-speed impact, and the particle velocity distributions of different graded foams were obtained. By combining the Lagrangian analysis method with the results of Taylor numerical tests, the effects of density gradient parameters on the local strain distribution, stress distribution, shock wave propagation and attenuation of metallic foams under high-speed impact were investigated. The results show that the metallic foams with negative density gradient have better resistance to vertical deformation than those with positive density gradient, and the deformation degree decreases with the decrease of the density gradient parameter. The local densification stress distribution of the metallic foams with negative density gradient decreases linearly, and the maximum local densification stress increases with the decrease of the density gradient parameter. The metallic foams with negative density gradient have high load bearing capability near the impact end. The local densification stress distribution of the metallic foams with positive density gradient has a plateau stage, and the maximum local densification stress is less than metallic foams with negative density gradient.

Keywords: Lagrangian analysis method; graded metallic foams; 3D-Voronoi technique; density gradient parameter

DOI: 10.11858/gywlxb.20190724

冲击载荷下分层梯度泡沫材料中的应力波传播特性

赵 转[1], 李世强[2], 刘志芳[2]

(1. 运城职业技术学院建筑工程系, 山西 运城 044000;
2. 太原理工大学机械与运载工程学院应用力学研究所, 山西 太原 030024)

摘要: 以一维应力波传播理论为基础, 建立了 3 层金属泡沫材料受到刚性块撞击时的理论模型, 研究了刚性块撞击 3 层泡沫圆杆时的动力响应过程, 从理论上给出了刚性块在撞击过程中的速度衰减规律数值解。利用 ANSYS/LS-DYNA 分析了受刚性块撞击时塑性应力波在 3 层泡沫材料中的传播过程, 比较了刚性块以及层间界面处节点速度的变化规律。通过对比有限元结果与理论结果发现: 理论模型能够较好地预测冲击载荷下分层泡沫材料各界面的速度衰减规律; 3 层梯度泡沫材料比相同质量的单层均质泡沫材料具有更加高效的吸能和缓冲能力。由于理论假设忽略了反射波以及泡沫材料应变硬化效应的影响, 理论解与有限元模拟结果之间存在一定的误差。

关键词: 分层泡沫材料; 动态压缩; 应力波; 理论模型

中图分类号: O347 **文献标识码:** A

多孔材料因其压缩应力-应变曲线包含一段较长的平台区域, 在受到冲击载荷时能够吸收较多的能量, 起到缓冲减震的功能, 在航空航天、交通运输等领域具有广泛的应用。然而受工业生产中金属发泡工艺本身的限制, 泡沫材料的厚度、平台应力以及密实化应变有限, 压缩效率较低, 单层泡沫材料作为吸能填充层在爆炸冲击中的缓冲和能量吸收能力受到制约[1]。分层泡沫材料在用作防护层时没有厚度限制, 可以根据载荷工况进行梯度及分层优化设计[2], 合理的分层泡沫组合能够对冲击波产生有效的衰减作用, 提高结构的抗冲击能力[3−4]。与均质多孔材料相比, 梯度和分层设计可以便捷地对不同性质的材料进行有序的组合, 并结合不同材料的特点, 充分发挥材料的吸能特性, 使之具有更加优越的性能, 因此分层梯度金属多孔材料及结构冲击动力学行为引起了广泛的关注[5−7]。

本研究以一维应力波传播理论为基础, 建立了 3 层梯度金属泡沫材料受到刚性块撞击时的理论模型, 分析各层界面速度的衰减规律, 并利用 ANSYS/LS-DYNA 分析受刚性块撞击时应力波在 3 层泡沫材料中的传播过程, 再与理论结果进行对比。

1 理论模型

Reid 等[8] 最早运用波阵面上的动量守恒条件, 研究了应力波在木头圆杆中的传播特性, 提出了有关应力波在多孔材料中传播的刚性理想塑性锁定模型(RPPL 模型)。Tan 等[9] 通过对冲击载荷下金属泡沫铝的动态压缩性能实验研究, 提出了有关泡沫铝材料在冲击作用下的冲击模型。Karagiozova[10] 针对刚性质量块撞击单层和双层梯度泡沫圆杆的动力响应及应力波传播问题, 利用能量守恒原理, 结合波阵面上的质量守恒及动态连续条件, 分析了质量块速度变化及衰减特征。

* 收稿日期: 2019-01-29; 修回日期: 2019-02-21
基金项目: 国家自然科学基金(11602161, 11772216); 山西省自然科学基金(201601D021025)
作者简介: 赵 转(1984—), 女, 硕士, 讲师, 主要从事冲击动力学研究. E-mail: zhaozhuan001@163.com
通信作者: 李世强(1986—), 男, 博士, 讲师, 主要从事冲击动力学、爆炸力学研究.
E-mail: lishiqiang@tyut.edu.cn

本研究以一维应力波传播理论为基础，建立质量为 M 的刚性质量块撞击一端固定的 3 层泡沫圆杆的理论模型，设泡沫圆杆的截面积为 A_0，时间为 t，撞击过程如图 1 所示。假设整个过程分为 3 个相互耦合的阶段：第 1 阶段（$0<t\leqslant t_1$）为塑性冲击波通过第 1 层泡沫之前；第 2 阶段（$t_1<t\leqslant t_2$）为塑性冲击波通过第 1 层泡沫至通过第 2 层泡沫之前；第 3 阶段（$t_2<t\leqslant t_3$）为塑性冲击波通过第 2 层泡沫至到达固定端之前。由于各层之间的波阻抗发生间断，压缩过程中前驱波可能导致各层之间的耦合压缩作用，这种耦合作用通过假设层间压缩区（Assumption of Compression Zone，如图 1 所示）来描述。理论模型中忽略泡沫材料界面间的反射作用，并且假设每层泡沫都符合 RPPL 模型[8]。

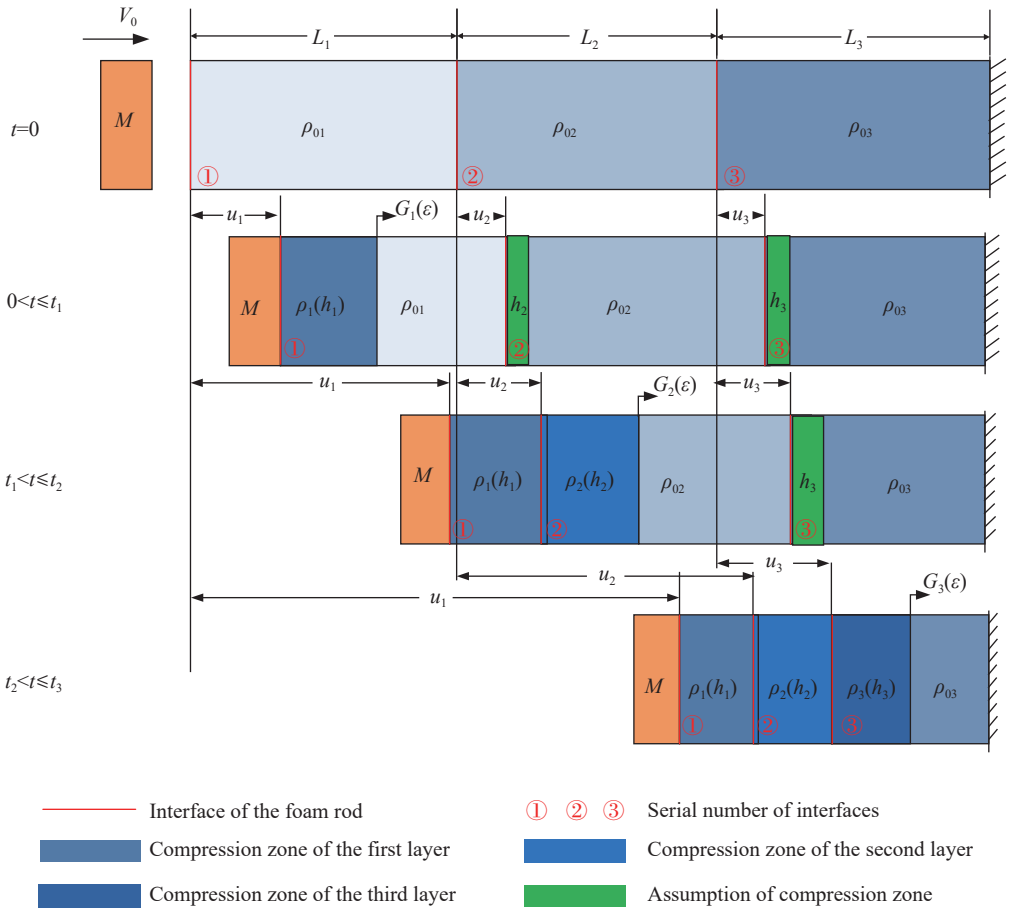


图 1　刚性质量块撞击一端固定的 3 层泡沫材料

Fig. 1　Impact of a rigid mass against a triple-layered foam material

假设刚性质量块的初始速度为 V_0，3 层泡沫圆杆的初始密度分别为ρ_{01}、ρ_{02}、ρ_{03}，初始长度分别为 L_1、L_2、L_3，初始平台屈服应力分别为σ_1^{Y}、σ_2^{Y}、σ_3^{Y}，泊松比均假设为零。根据波阵面上的质量守恒及动量守恒定律[8, 11]，得到如下结果。

（1）第 1 阶段。当$0\leqslant t\leqslant t_1$时，初始条件为：各界面速度$V_1(0)=V_0$，$V_2(0)=0$，$V_3(0)=0$；各压缩区长度$h_1(0)=0$，$h_2(0)=0$，$h_3(0)=0$；各界面位移$u_1(0)=0$，$u_2(0)=0$，$u_3(0)=0$；压缩过程中假设自由端速度$V_1=\mathrm{d}u_1/\mathrm{d}t$，第 1 界面处速度为 $V_2=\mathrm{d}u_2/\mathrm{d}t$，第 2 界面处速度为 $V_3=\mathrm{d}u_3/\mathrm{d}t$。对刚性质量块和第 1 层泡沫杆压缩区域（压缩长度为 h_1，如图 1（b）所示）列动量守恒方程

$$\begin{aligned}&\{M/A_0+\rho_{01}[u_1+\delta u_1+h_1+\delta h_1-(u_2+\delta u_2)]\}(V_1+\delta V_1)-\\&\quad[M/A_0+\rho_{01}(u_1+h_1-u_2)]V_1-\rho_{01}(\delta u_1+\delta h_1-\delta u_2)V_2=-\sigma_1^{\mathrm{Y}}\delta t\end{aligned}\tag{1}$$

即

$$[M/A_0+\rho_{01}(u_1+h_1-u_2)]\delta V_1+\rho_{01}(V_1-V_2)(\delta u_1+\delta h_1-\delta u_2)=-\sigma_1^{\mathrm{Y}}\delta t \tag{2}$$

由于$\dfrac{\mathrm{d}h_1}{\mathrm{d}t}=G_1-(V_1-V_2)$, 冲击波波速$G_1(\varepsilon)=\dfrac{V_1-V_2}{\varepsilon_1}$, ε_1为第 1 层泡沫材料的密实化应变, 所以当$\delta t\to 0$时, (2)式可写为

$$[M/A_0+\rho_{01}(u_1+h_1-u_2)]\frac{\mathrm{d}V_1}{\mathrm{d}t}+\rho_{01}(V_1-V_2)\frac{\mathrm{d}u_1+\mathrm{d}h_1-\mathrm{d}u_2}{\mathrm{d}t}=[M/A_0+\rho_{01}(u_1+h_1-u_2)]\frac{\mathrm{d}V_1}{\mathrm{d}t}+$$

$$\rho_{01}(V_1-V_2)\{[G_1-(V_1-V_2)]+V_1-V_2\}=[M/A_0+\rho_{01}(u_1+h_1-u_2)]\frac{\mathrm{d}V_1}{\mathrm{d}t}+\rho_{01}\frac{(V_1-V_2)^2}{\varepsilon_1}=-\sigma_1^{\mathrm{Y}} \tag{3}$$

于是

$$\frac{\mathrm{d}V_1}{\mathrm{d}t}=-\left[\sigma_1^{\mathrm{Y}}+\rho_{01}\frac{(V_1-V_2)^2}{\varepsilon_1}\right]\frac{1}{M/A_0+\rho_{01}A_0(u_1+h_1-u_2)} \tag{4}$$

在此阶段, 可以记②号界面(如图 1 所示)上的压力为p_1, 通过假设右侧第 2 层泡沫杆压缩段的长度为 h_2 来考虑耦合压缩作用, 对第 2 层泡沫杆压缩段列动量守恒方程

$$\rho_{02}[h_2+u_2+\delta h_2+\delta u_2+(u_3+\delta u_3)](V_2+\delta V_2)-\rho_{02}(h_2+u_2-u_3)V_2=(p_1-\sigma_2^{\mathrm{Y}})\delta t \tag{5}$$

当$\delta t\to 0$时

$$\rho_{02}(h_2+u_2-u_3)\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t}+\rho_{02}V_2\frac{\mathrm{d}(h_2+u_2-u_3)}{\mathrm{d}t}=p_1-\sigma_2^{\mathrm{Y}} \tag{6}$$

同样有如下关系: $\dfrac{\mathrm{d}h_2}{\mathrm{d}t}=G_2-(V_2-V_3)$, 冲击波波速$G_2(\varepsilon)=\dfrac{V_2-V_3}{\varepsilon_2}$, ε_2为第 2 层泡沫材料的密实化应变, $V_3=\dfrac{\mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t}$。代入(6)式, 可得

$$\rho_{02}(h_2+u_2-u_3)\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t}=p_1-(\sigma_2^{\mathrm{Y}}+\rho_{02}V_2G_2) \tag{7}$$

由于惯性效应, 压缩区动态应力符合如下关系

$$\sigma_2^{\mathrm{d}}=\sigma_2^{\mathrm{Y}}+\rho_{02}(V_2-V_3)G_2 \tag{8}$$

联合 (7) 式和 (8) 式, 得到

$$\rho_{02}(h_2+u_2-u_3)\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t}=p_1-\sigma_2^{\mathrm{d}} \tag{9}$$

对第 1 层泡沫杆未压缩段列动量守恒方程

$$\rho_{01}[L_1-(h_1+u_1-u_2)]\delta V_2-\rho_{01}(V_1+\delta V_1)(\delta h_1+\delta u_1-\delta u_2)+\rho_{01}V_2(\delta h_1+\delta u_1-\delta u_2)=(\sigma_1^{\mathrm{d}}-p_1)\delta t \tag{10}$$

略去无穷小量$(\delta h_1\delta V_1+\delta u_1\delta V_1-\delta u_2\delta V_1)$, 则

$$\rho_{01}[L_1-(h_1+u_1-u_2)]\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t}-\rho_{01}V_1\frac{\mathrm{d}(h_1+u_1-u_2)}{\mathrm{d}t}+\rho_{01}V_2\frac{\mathrm{d}(h_1+u_1-u_2)}{\mathrm{d}t}=\sigma_1^{\mathrm{d}}-p_1 \tag{11}$$

式中: $\sigma_1^{\mathrm{d}}=\sigma_1^{\mathrm{Y}}+\rho_{01}(V_1-V_2)G_1$。由此可得

$$\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t}=-\left[\sigma_2^{\mathrm{Y}}+\rho_{02}\frac{(V_2-V_3)^2}{\varepsilon_2}-\sigma_1^{\mathrm{Y}}\right]\cdot\frac{1}{\rho_{02}(h_2+u_2-u_3)+\rho_{01}[L_1-(u_1+h_1-u_2)]} \tag{12}$$

同样, 在此阶段记③号界面上的压力为p_2, 通过假设右侧第 3 层泡沫杆压缩段的长度为 h_3 来考虑耦合压缩作用, 对第 3 层泡沫杆压缩段列动量守恒方程

$$\rho_{03}(h_3+u_3+\delta h_3+\delta u_3)(V_3+\delta V_3)-\rho_{03}(h_3+u_3)V_3=(p_2-\sigma_3^{\mathrm{Y}})\delta t \tag{13}$$

当$\delta t\to 0$时

$$\rho_{03}(h_3+u_3)\frac{\mathrm{d}V_3}{\mathrm{d}t}+\rho_{03}V_3\frac{\mathrm{d}(h_3+u_3)}{\mathrm{d}t}=p_2-\sigma_3^{\mathrm{Y}} \tag{14}$$

因为$\dfrac{\mathrm{d}h_3}{\mathrm{d}t}=G_3-V_3$, 冲击波波速$G_3(\varepsilon)=\dfrac{V_3}{\varepsilon_3}$, ε_3为第 3 层泡沫材料的密实化应变, $V_3=\dfrac{\mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t}$, 则

$$\sigma_3^{\mathrm{d}} = \sigma_3^{\mathrm{Y}} + \rho_{03} V_3 G_3 \tag{15}$$

联合 (14) 式和 (15) 式, 有

$$\rho_{03}(h_3 + u_3)\frac{\mathrm{d}V_3}{\mathrm{d}t} = p_2 - \sigma_3^{\mathrm{d}} \tag{16}$$

对第 2 层泡沫杆未压缩段列动量守恒方程

$$\rho_{02}[L_2 - (h_2 + u_2 - u_3)]\delta V_3 - \rho_{02}(V_2 + \delta V_2)(\delta h_2 + \delta u_2 - \delta u_3) + \rho_{02} V_3(\delta h_2 + \delta u_2 - \delta u_3) = (\sigma_2^{\mathrm{d}} - p_2)\delta t \tag{17}$$

略去无穷小量$(\delta h_1 \delta V_1 + \delta u_1 \delta V_1 - \delta u_2 \delta V_1)$, 则

$$\rho_{02}[L_2 - (h_2 + u_2 - u_3)]\frac{\mathrm{d}V_3}{\mathrm{d}t} - \rho_{02} V_2 \frac{\mathrm{d}(h_2 + u_2 - u_3)}{\mathrm{d}t} + \rho_{02} V_3 \frac{\mathrm{d}(h_2 + u_2 - u_3)}{\mathrm{d}t} = \sigma_2^{\mathrm{d}} - p_2 \tag{18}$$

所以有

$$\frac{\mathrm{d}V_3}{\mathrm{d}t} = -\left(\sigma_3^{\mathrm{Y}} + \rho_{03}\frac{V_3^2}{\varepsilon_3} - \sigma_2^{\mathrm{Y}}\right)\cdot \frac{1}{\rho_{03}(h_3 + u_3) + \rho_{02}[L_2 - (u_2 + h_2 - u_3)]} \tag{19}$$

(2)第 2 阶段。$t_1 < t \leqslant t_2$, $V_1 = V_2$, $\dfrac{\mathrm{d}h_2}{\mathrm{d}t} = G_2 - (V_2 - V_3)$, $G_2(\varepsilon) = \dfrac{V_2 - V_3}{\varepsilon_2}$, $\dfrac{\mathrm{d}u_2}{\mathrm{d}t} = V_2$, $\dfrac{\mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t} = V_3$, 根据波阵面上的动量守恒条件

$$\begin{aligned}&\{M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}[u_2 + \delta u_2 + h_2 + \delta h_2 - (u_3 + \delta u_3)]\}(V_2 + \delta V_2) - \\ &[M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}(u_2 + h_2 - u_3)]V_2 - \rho_{02}(\delta u_2 + \delta h_2 - \delta u_3)V_3 = -\sigma_{\mathrm{Y2}}\delta t\end{aligned} \tag{20}$$

$$[M/A_0 + \rho_{01}(u_1 + h_1 - u_2)\delta V_1 + \rho_{01}(V_1 - V_2)(\delta u_1 + \delta h_1 - \delta u_2) = -\sigma_{\mathrm{Y1}}\delta t \tag{21}$$

$$\begin{aligned}&[M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}(u_2 + h_2 - u_3)]\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t} + \rho_{02}(V_2 - V_3)\frac{\mathrm{d}u_2 + \mathrm{d}h_2 - \mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t} = \\ &[M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}(u_2 + h_2 - u_3)]\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t} + \rho_{02}(V_2 - V_3)\{[G_2 - (V_2 - V_3)] + V_2 - V_3\} = \\ &[M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}(u_2 + h_2 - u_3)]\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t} + \rho_{02}\frac{(V_2 - V_3)^2}{\varepsilon_2} = -\sigma_{\mathrm{Y2}}\end{aligned} \tag{22}$$

可得

$$\frac{\mathrm{d}V_2}{\mathrm{d}t} = -\left[\sigma_{\mathrm{Y2}} + \rho_{02}\frac{(V_2 - V_3)^2}{\varepsilon_2}\right]\frac{1}{M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}A_0(u_2 + h_2 - u_3)} \tag{23}$$

$$\frac{\mathrm{d}V_3}{\mathrm{d}t} = -\left(\sigma_3^{\mathrm{Y}} + \rho_{03}\frac{V_3^{\,2}}{\varepsilon_3} - \sigma_2^{\mathrm{Y}}\right)\cdot \frac{1}{\rho_{03}(h_3 + u_3) + \rho_{02}[L_2 - (u_2 + h_2 - u_3)]} \tag{24}$$

其中初始条件: $V_2(t_1) = V_1(t_1)$, $h_2(t_1) = 0$, $h_3(t_1) = 0$, $u_2(t_1) = \bar{u}_2$, $u_3(t_1) = \bar{u}_3$。

(3)第 3 阶段。$t_2 < t \leqslant t_3$, $V_1 = V_2 = V_3$时

$$\frac{\mathrm{d}V_3}{\mathrm{d}t} = -\left(\sigma_3^{\mathrm{Y}} + \rho_{03}\frac{V_3^2}{\varepsilon_3}\right)\frac{1}{M/A_0 + \rho_{01}L_1 + \rho_{02}L_2 + \rho_{03}(u_3 + h_3)} \tag{25}$$

$$\frac{\mathrm{d}h_3}{\mathrm{d}t} = G_3 - V_3, \quad G_3(\varepsilon) = \frac{V_3}{\varepsilon_3}, \quad \frac{\mathrm{d}u_3}{\mathrm{d}t} = V_3 \tag{26}$$

初始条件: $V_3(t_2) = V_2(t_2)$, $h_3(t_2) = 0$, $u_3(t_2) = \bar{\bar{u}}_3$。

利用 Runge-Kutta 方法, 将各阶段初始条件代入(4)式、(12)式、(19)式、(23)式、(24)式和(25)式, 可求得各界面速度随时间变化规律的数值解。

2　有限元计算

为了验证理论模型的可靠性, 建立如图 2 所示的有限元模型(1/4 模型)。刚性块的质量 M 为 370 g, 泡沫杆直径为 100 mm, 3 层泡沫杆的参数如表 1 所示。

表 1　泡沫杆参数

Table 1　Parameters of the foam rod

L_1/mm	L_2/mm	L_3/mm	ρ_{01}/(kg·m^{-3})	ρ_{02}/(kg·m^{-3})	ρ_{03}/(kg·m^{-3})
30	40	60	570	410	253

在有限元计算中，泡沫材料通过 Crushable Foam 模型模拟其压缩变形，图 2 给出了 3 种不同密度的 Cymat 泡沫铝的准静态压缩应力-应变曲线。为了记录压缩过程中各界面的速度变化规律，分别在刚性块与第 1 层泡沫杆及中间泡沫杆界面处选择节点 1、2、3，记录压缩过程中层间界面的速度时程曲线。

图 3 对比了有限元模拟结果和理论模型计算结果，并且与相同质量的单层泡沫圆杆（单层泡沫杆长度 L_1=200 mm，密度ρ=253 kg/m^3）的理论和有限元结果进行了比较。从图 3 可以看出，理论结果与有限元模拟结果吻合较好，说明理论模型能够较好地预测冲击载荷下分层泡沫材料各界面的速度衰减规律。

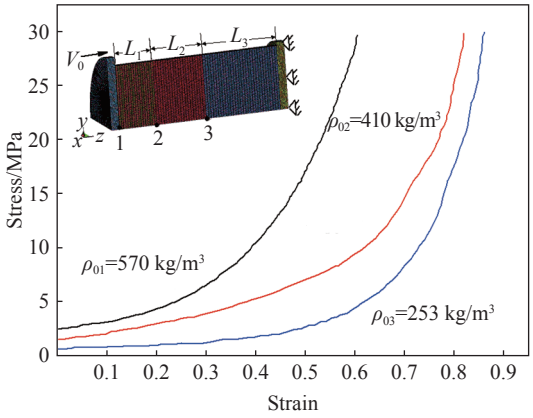


图 2　3 层泡沫铝圆杆受刚性块撞击的有限元模型及 3 种 Cymat 泡沫铝压缩应力-应变曲线

Fig. 2　Triple layer foam rod impacted by a rigid mass and stress-strain curves of three Cymat foam

由图 3 可知，在整体质量一定的情况下，增加泡沫材料的层数时，理论结果与有限元模拟结果之间的相对偏差增加。这是由于：理论计算中将连续的压缩过程假设为相互耦合的 3 个阶段，各阶段之间的计算误差不断累积；并且在有限元计算中泡沫铝材料的应力-应变关系为单轴压缩实验曲线，随着应变的增加有明显的硬化现象，而理论计算并未考虑应变硬化的影响，压缩过程中平台应力保持恒定，所以在整个压缩过程中刚性块速度的有限元结果略高于理论结果。从图 3 中还可以看出，在理论模型中第 1 阶段和第 2 阶段对应的时间分别为 t_1=0.16 ms 和 t_2=0.33 ms，数值模拟中则分别为 t_1=0.15 ms 和 t_2=0.39 ms。在 3 层泡沫材料的有限元结果中，节点 2 的速度与节点 1 速度相等之后会略微超越节点 1 的速度，节点 3 也有类似情况，这是由于：冲击波在截面处发生反射，反射波抑制了波阵面后方节点的运动，而在理论计算中并未考虑界面处反射波的作用。

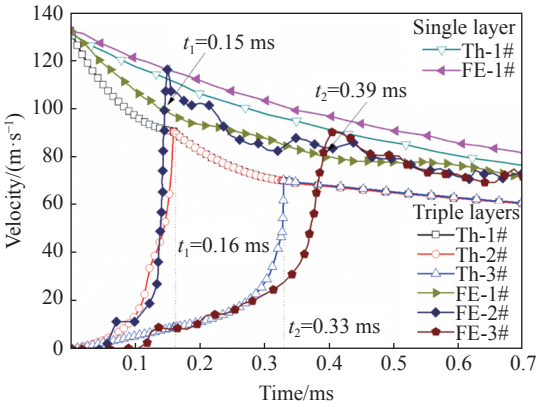


图 3　各节点速度变化规律对比

Fig. 3　Comparison of velocity profiles

比较单层和 3 层泡沫材料节点 1 的结果发现：在相同的冲击速度下，3 层梯度泡沫材料对刚性块的衰减作用更明显，且相同质量的 3 层泡沫材料的总长度更短，所以分层梯度泡沫材料具有更高的压缩效率[11] 以及更有效的吸能和缓冲效果。

3　结　论

在理论分析刚性质量块撞击分层梯度泡沫材料的动力响应过程的基础上，利用 ANSYS/LS-DYNA 建立了相应的有限元模型，分析了受刚性块撞击时应力波在 3 层泡沫材料中的传播过程，比较了层间界面的速度变化规律。根据波阵面上动量守恒关系与一维应力波传播理论，建立了刚性块撞击分层泡沫材料时各界面速度衰减规律的理论模型，利用 Runge-Kutta 方法给出了理论模型的数值解，理

论计算结果与有限元模拟结果吻合较好，说明理论模型能够较好地预测冲击载荷下分层梯度泡沫材料各界面的速度衰减规律。然而，由于在理论计算中忽略了反射波以及泡沫材料应变硬化效应的影响，理论解与有限元模拟结果之间存在一定偏差。从有限元结果还发现，在相同质量和冲击速度下，与单层泡沫材料相比，3 层梯度泡沫材料具有更高效的吸能和缓冲能力。

参考文献：

[1] MA G W, YE Z Q. Energy absorption of double-layer foam cladding for blast alleviation [J]. International Journal of Impact Engineering, 2007, 34(2): 329–347.

[2] GARDNER N, SHUKLA A. The blast response of sandwich composites with a functionally graded core and polyurea interlayer [M]//Dynamic Behavior of Materials. New York: Springer, 2011: 215–223.

[3] WANG E, GARDNER N, SHUKLA A. The blast resistance of sandwich composites with stepwise graded cores [J]. International Journal of Solids and Structures, 2009, 46(18/19): 3492–3502.

[4] LI S, LI X, WANG Z, et al. Sandwich panels with layered graded aluminum honeycomb cores under blast loading [J]. Composite Structures, 2017, 173: 242–254.

[5] LI S, LI X, WANG Z, et al. Finite element analysis of sandwich panels with stepwise graded aluminum honeycomb cores under blast loading [J]. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 2016, 80: 1–12.

[6] LIU X, TIAN X, LU T J, et al. Blast resistance of sandwich-walled hollow cylinders with graded metallic foam cores [J]. Composite Structures, 2012, 94(8): 2485–2493.

[7] ZHANG L, HEBERT R, WRIGHT J T, et al. Dynamic response of corrugated sandwich steel plates with graded cores [J]. International Journal of Impact Engineering, 2014, 65: 185–194.

[8] REID S R, PENG C. Dynamic uniaxial crushing of wood [J]. International Journal of Impact Engineering, 1997, 19(5/6): 531–570.

[9] TAN P J, REID S R, HARRIGAN J J, et al. Dynamic compressive strength properties of aluminium foams. Part II—'shock' theory and comparison with experimental data and numerical models [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2005, 53(10): 2206–2230.

[10] KARAGIOZOVA D. Velocity attenuation and force transfer by a single-and double-layer claddings made of foam materials [J]. International Journal of Protective Structures, 2011, 2(4): 417–437.

[11] GURUPRASAD S, MUKHERJEE A. Layered sacrificial claddings under blast loading Part I —analytical studies [J]. International Journal of Impact Engineering, 2000, 24(9): 957–973.

Stress Waves Propagation in Layered Graded Cellular Materials under Dynamic Crush Loading

ZHAO Zhuan[1], LI Shiqiang[2], LIU Zhifang[2]

(1. *Department of Architecture and Civil Engineering*, *Yuncheng Polytechnic College*, *Yuncheng* 044000, *China*;
2. *Institute of Applied Mechanics*, *College of Mechanical and Vehicle Engineering*,
Taiyuan University of Technology, *Taiyuan* 030024, *China*)

Abstract: The theoretical mode of velocity attenuation of rigid mass and the stress wave propagation in layered cellular materials under dynamic impact loading has been proposed based on the 1-D wave theory and the dynamic response process of a foam rod strike by a rigid mass has been studied. A finite element (FE) validation has been conducted by employing ANSYS/LS-DYNA software, agreeing well with the theoretical results. The compared results show that the triple layered graded foam material has better impact reduction and energy absorption capacity than the uniform foam with the same mass. Due to the reflected wave and the strain hardening effects not considered in the theoretical model, there are some acceptable errors between the theoretical and FE results.

Keywords: layered cellular material; dynamic crushing; stress wave; theoretical model

DOI: 10.11858/gywlxb.20190759

面内冲击荷载下半凹角蜂窝的抗冲击特性

陈 鹏,侯秀慧,张 凯

(西北工业大学力学与土木建筑学院,陕西 西安 710072)

摘要: 半凹角蜂窝结构因其零泊松比特征,具有独特的变形方式。将其与传统正泊松比(正六边形)蜂窝以及负泊松比(凹角)蜂窝在面内冲击荷载作用下的抗冲击性能进行对比分析,揭示出零泊松比效应对动力学性能的影响。在给定胞元几何参数(长细比)的情况下,分析了 3 种蜂窝构型在不同冲击速度下的变形特征,得出半凹角蜂窝的零泊松比特性使结构的局部变形带以“I”型为主。根据一维冲击波理论,推导出半凹角蜂窝的平均抗压强度理论公式,与有限元结果进行对比,验证了该方法的有效性。数值结果表明,半凹角蜂窝的抗冲击性能介于正六边形蜂窝和凹角蜂窝之间。通过在半凹角蜂窝内部增加直杆,设计出一种新型零泊松比蜂窝,进一步提高了蜂窝结构的抗冲击性能,可为其他结构优化设计提供一定的理论参考。

关键词: 半凹角蜂窝;零泊松比;面内冲击;抗压强度

中图分类号: O347.3 **文献标识码:** A

智能飞行器可以根据飞行需要主动改变其外形,使飞行器更加节能和高效。飞行器在变形过程中,蒙皮也会产生伸缩或弯曲变形。传统的蒙皮材料以铝合金为主,其变形能力难以满足智能飞行器的变形要求,严重影响了飞行的安全性,因此需要对蒙皮材料进行功能优化设计。蜂窝结构作为一种典型的多胞材料,具有轻质、高强、吸能、隔热等优点,被广泛应用在航空航天、建筑、汽车等领域[1]。通过改变结构内部拓扑构型,蜂窝结构可以呈现出不同的力学性能[2],如不同的热膨胀系数、刚度和泊松比特性。正泊松比蜂窝发生弯曲变形时,在弯曲方向上受拉,其横向收缩,形成马鞍形结构;与正泊松比蜂窝相反,负泊松比蜂窝横向被拉伸延长,呈拱形。零泊松比蜂窝在弯曲变形时,横向尺寸不会发生改变,从而形成圆柱形结构,所以不存在同向或反向曲率问题[3]。零泊松比蜂窝这种独特的变形方式使其更加适合应用于圆柱形夹板、纯圆柱弯曲或一维变形等结构设计[3−6]。因此,将零泊松比蜂窝结构应用到智能飞行器蒙皮结构中,有望满足其飞行安全性要求。

作为智能飞行器的重要部件之一,柔性蒙皮需要同时具备可变形性和抗冲击的能力。蜂窝结构在冲击或爆炸荷载作用下,其名义应力-应变曲线会产生应力平台阶段,该阶段的应力值会在较大的应变范围内围绕一个固定值上下波动,从而呈现出优异的抗冲击性能[7]。基于飞行环境的多样性,如飞鸟和碎片碰撞,冲击可能发生在蜂窝结构的任意方向,因此,在智能飞行器蒙皮中采用蜂窝结构时,不仅需要研究其面外抗冲击性能,其面内抗冲击性能也十分重要[8]。正六边形蜂窝是一种典型的正泊松比蜂窝,不少学者对其抗冲击性能进行了大量的研究[8−12]。Ruan 等[9] 利用有限元仿真提出了正六边形蜂窝在面内冲击荷载作用下的 3 种变形模式,胡玲玲等[8, 10−11] 通过实验和数值模拟研究了胞元扩张角对六

* 收稿日期: 2019-04-15; 修回日期: 2019-04-26

基金项目: 国家自然科学基金(11402035);陕西省自然科学基金(2017JM1012);中央高校基本科研业务费(3102018ZY017);钱学森空间技术实验室种子基金(QXS-ZZJJ-02)

作者简介: 陈 鹏(1993—),男,硕士研究生,主要从事多孔轻质结构抗冲击性能研究. E-mail: mutouseng123@163.com

通信作者: 侯秀慧(1983—),女,博士,讲师,主要从事多孔金属材料多功能特性及碳纳米管基本力学行为等研究. E-mail: houxiuhui@nwpu.edu.cn

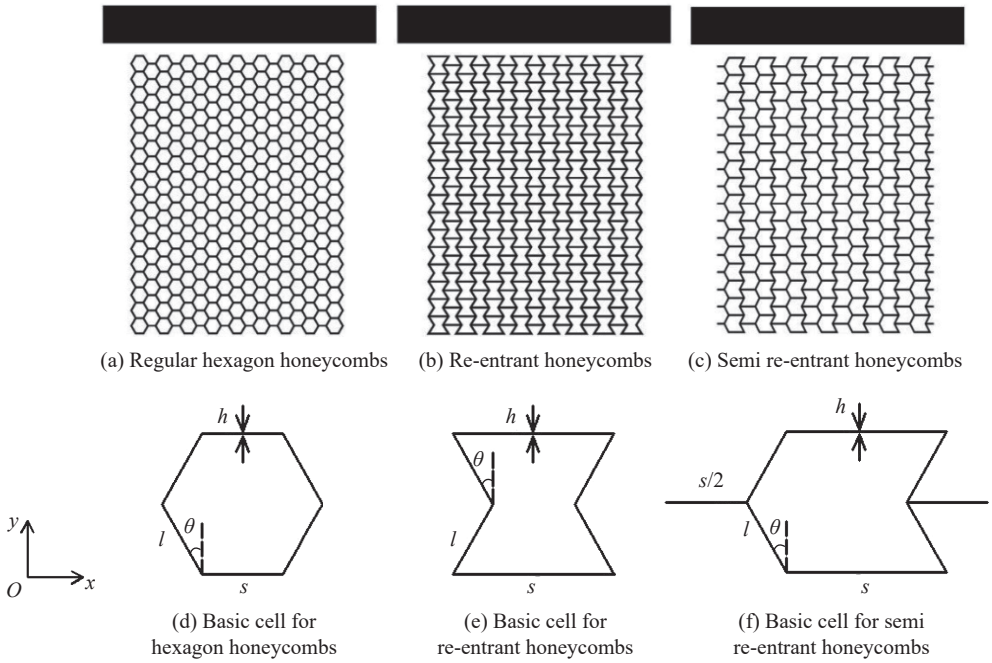
边形蜂窝面内变形模式的影响，并对低速和高速冲击荷载作用下的平台应力进行了理论推导。由于内凹或旋转机制的存在，蜂窝结构呈现出负泊松比特性[13−14]，在冲击荷载作用下，展现出与正泊松比蜂窝不同的变形模式以及更佳的吸能效果。张新春等[15]的研究表明，凹角蜂窝的面内变形模式主要取决于胞元扩张角和冲击速度。此外，其相对密度、胞壁厚度和胞元是否规则对能量吸收影响很大[16]，并且凹角蜂窝的抗冲击性能优于正六边形蜂窝[17]。对零泊松比蜂窝的研究主要集中在模型构建、优化以及准静态力学性能分析方面[3−6, 18]，涉及冲击动力学性能的研究文献相对较少。

针对一种零泊松比蜂窝结构（半凹角蜂窝），讨论其在不同冲击速度、不同结构几何参数下的变形模式。根据一维冲击波理论[19]，给出其在冲击荷载作用下动态抗压强度的理论公式，并与传统正泊松比蜂窝结构、负泊松比蜂窝结构的抗冲击性能进行对比分析。基于以上研究，通过构型设计，在半凹角蜂窝内部增加直杆，得到一种新型的零泊松比蜂窝结构[18]，以期有效提高其抗冲击性能，为结构优化以及智能飞行器蒙皮结构设计提供一定的理论参考。

1　模型参数设计和准静态性能分析

1.1　计算模型

图 1 给出了正六边形蜂窝、凹角蜂窝、半凹角蜂窝分析模型及其代表性胞元。3 种蜂窝模型尺寸相同，均为 67.5 mm×75.3 mm。胞壁长度 l 为 2.7 mm，壁厚 h 取 0.2、0.3、0.4、0.5 mm，胞壁倾斜角 θ=30°。假设 $s = 2l$，蜂窝沿面外方向的厚度 b 均为 1 mm。蜂窝试件的基体材料选用金属铝，假定满足理想弹塑性模型，其杨氏模量 E_s= 69 GPa，密度 ρ_s = 2 700 kg/m^3，泊松比 μ = 0.3，屈服应力 σ_{ys} = 76 MPa。借助显式动力学有限元软件 ANSYS/LS-DYNA 进行模拟，计算中选用 Shell163 单元，试件上方的钢板视为刚体，其密度 ρ=7 860 kg/m^3，杨氏模量 E = 210 GPa。刚性板与试件之间无摩擦，接触方式采用单面自动通用接触。为保证计算结果的收敛性，沿单元厚度方向取 5 个积分点。此外，当刚性板沿 y 方向以恒定的速度 v 冲击蜂窝试件时，试件底端固定，左右两端及上部自由。为使蜂窝仅发生面内变形，对试件上的所有节点施加面外约束。



(a) Regular hexagon honeycombs　(b) Re-entrant honeycombs　(c) Semi re-entrant honeycombs

(d) Basic cell for hexagon honeycombs　(e) Basic cell for re-entrant honeycombs　(f) Basic cell for semi re-entrant honeycombs

图 1　正六边形蜂窝、凹角蜂窝和半凹角蜂窝结构模型及代表性胞元

Fig. 1　Structural models and representative basic cells for regular hexagon honeycombs, re-entrant honeycombs and semi re-entrant honeycombs

1.2　泊松比计算

如图 2 所示, 代表性胞元尺寸为: $L_x=2s$, $L_y=2l\cos\theta$。为了得到半凹角蜂窝结构的泊松比, 沿 y 方向施加均布力σ。在荷载作用下, 倾斜的胞壁会发生弯曲变形, 如图 2 所示。根据标准梁理论[20], 对于长度为l、厚度为 h 的胞壁, 其挠度δ为

$$\delta=\frac{bh^3}{12E_sI} \tag{1}$$

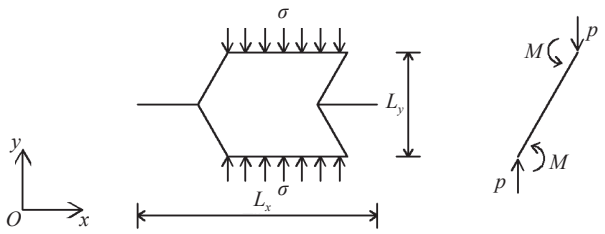


图 2　半凹角蜂窝代表性胞元受力分析

Fig. 2　Force analysis of representative cell of semi re-entrant honeycombs

式中: E_s为基体材料的弹性模量, I 为基体材料的二次惯性矩。

根据力的平衡关系, 得出倾斜胞壁沿 x、y 方向的挠度大小分别为

$$\delta_x=\frac{pl^3\sin\theta\cos\theta}{12E_sI},\quad \delta_y=\frac{pl^3\sin^2\theta}{12E_sI} \tag{2}$$

根据应变的计算公式, 可得 y 方向的应变为

$$\varepsilon_y=\frac{\delta_y}{L_y}=\frac{pl^2\sin^2\theta}{24E_sI\cos\theta} \tag{3}$$

由于结构的一端内凹, 一端凸出, 因此结构两端沿 x 方向的挠度大小相等, 方向相反。通过分析可知, 倾斜胞壁由于受到压缩, 致使相邻水平直杆沿 x 轴负方向偏移, 且结构左右两端偏移长度相等, 即结构水平方向尺寸没有发生变化。综上, 结构沿 x 方向的应变为

$$\varepsilon_x=0 \tag{4}$$

结合(4)式可知, 该半凹角六边形蜂窝结构的泊松比[3] 为

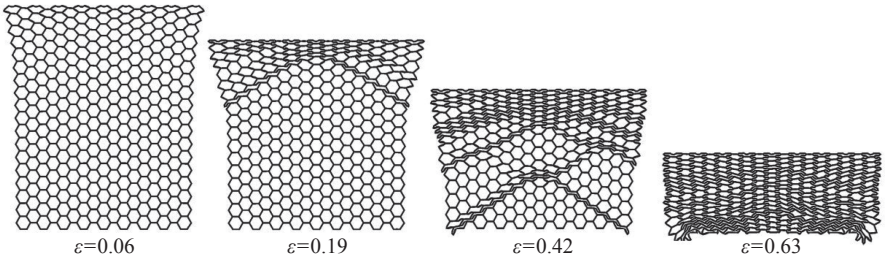
$$\mu_{yx}=-\frac{\varepsilon_x}{\varepsilon_y}=0 \tag{5}$$

由于半凹角蜂窝兼具正六边形蜂窝和凹角蜂窝的构型特征, 因此零泊松比特性也与其结构构型特征密切相关, 为了探讨泊松比变化对蜂窝动态响应模式的影响, 采用类似的方法可得正六边形蜂窝结构和凹角蜂窝结构的泊松比[17], 以作对比分析, 即: (1)对于正六边形蜂窝结构, $\theta=\frac{\pi}{6}$, $\mu_{yx}=1$; (2)对于凹角蜂窝结构: $\theta=-\frac{\pi}{6}$, $\mu_{yx}=-1$; 对于半凹角蜂窝结构, $\theta=\frac{\pi}{6}$, $\mu_{yx}=0$。

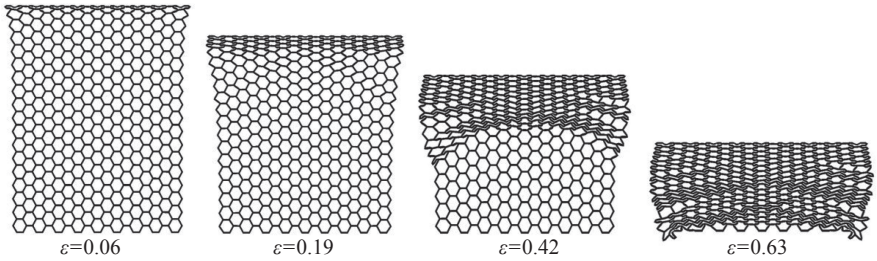
2　有限元结果讨论与分析

2.1　不同泊松比蜂窝变形模式

以正六边形蜂窝结构的变形模式为参照, 验证所建立模型的有效性, 取胞壁厚度 0.5 mm, 建立与文献 [9] 完全相同的计算模型, 采取相同的边界条件, 分析正六边形蜂窝结构的动态响应特征。如图 3 所示, 当刚性板的冲击速度 v=35 m/s 时, 冲击端附近的胞元首先发生坍塌并向外扩张。其力学机理可归因于正六边形蜂窝的正泊松比特性, 即在单向压缩状态下, 蜂窝结构在与荷载垂直的方向会发生膨胀, 造成横向尺寸变大。随后更多的胞元进入压溃区域, 试件的不均匀变形会逐渐形成“V”型剪切变形带并传向固定端; 随着应变的持续增大, 固定端附近出现“V”型剪切变形带但位置几乎没有发生改变; 当两个“V”型剪切带重合, 试件整体均匀变形, 直至试件被完全压溃。当 v=70 m/s 时, 没有出现明显的“X”型或“V”型局部变形带模式, 此时蜂窝结构的正泊松比特性减弱, 惯性作用增强并处于主导地位, 变形带集中在冲击端, 呈“I”型, 并以冲击波的形式逐层传递到固定端, 直至压缩密实, 与文献 [9] 中所得结果基本一致。最后将不同壁厚、不同冲击速度下得出的蜂窝平均抗压强度数值与文献对比, 如表 1 所示, 相对偏差均小于 10%, 从而进一步证明所建模型的有效性。



(a) v=35 m/s



(b) v=70 m/s

图 3　不同冲击速度下正六边形蜂窝的变形模式

Fig. 3　Deformation modes of regular hexagon honeycombs under different impact velocities

表 1　正六边形蜂窝的平均抗压强度

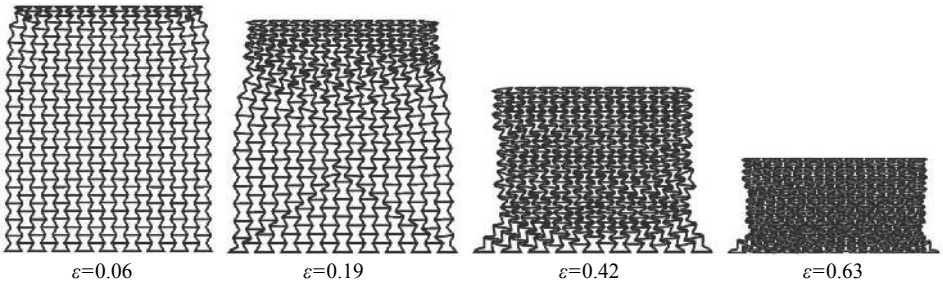
Table 1　Average crushing strength of regular hexagon honeycombs

h/mm	v/(m·s^{-1})	Average crushing strength/MPa		Deviation/%
		Ref.[9]	Numerical	
0.3	70	2.491	2.287	8.19
0.3	100	4.677	4.893	4.62
0.4	70	3.777	3.952	4.63
0.4	100	6.802	7.384	8.56

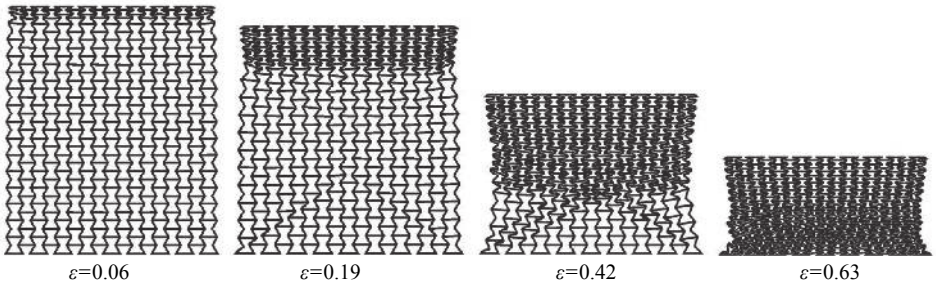
图 4 给出了 v=35 m/s 和 v=70 m/s、壁厚均为 0.5 mm 时凹角蜂窝结构在冲击荷载作用下的变形模式。凹角蜂窝结构在单向压缩下，与荷载垂直的方向会发生收缩，即“颈缩”现象。与正六边形蜂窝结构不同，凹角蜂窝胞元中间胞壁向内侧凹陷，基于内凹机制，呈现出负泊松比特性，从而导致了其独特的变形模式。当刚性板的冲击速度 v=35 m/s，冲击端附近的胞元发生明显的侧向收缩，随后固定端出现“V”型剪切变形带；当所有胞元收缩完成，“V”型剪切变形带消失，形成“I”型局部变形带并向固定端传播，直至整个结构压溃周期结束。随着冲击速度的提高，例如 v=70 m/s，负泊松比蜂窝特有的“颈缩”现象依旧存在但没有之前明显，其原因为此时惯性对蜂窝变形起主导作用，凹角蜂窝的负泊松比特性减弱；蜂窝结构变形带以“I”型逐层传递，且固定端出现“V”型局部变形带；随着更多的胞元进入压溃区域，局部变形带逐渐减小；最后，变形带消失，蜂窝结构整体均匀变形。

在上述研究基础上，系统研究了半凹角蜂窝结构在不同冲击速度下的动态响应特性，取胞壁厚度 h=0.5 mm。对于低速冲击（v=10 m/s），当刚性板压缩试件，冲击端第 1 层胞元首先发生变形，但与正、负泊松比蜂窝不同，半凹角蜂窝胞元破坏时无明显收缩或扩张现象发生。在首层胞元上半部完全坍塌之后，底层胞元才开始发生破坏，冲击端附近呈现“I”型的局部变形带。其力学机理可归因于半凹角蜂窝的零泊松比特性，即其纵向被压缩时，横向尺寸不会增大或减小，试件整体均匀变形造成无“V”型剪切变形带出现。随着压缩应变的逐渐增大，试件变形主要集中在冲击端，并向固定端传播直至与固定端处的变形带重合，两端变形带消失，且中间伴有失稳现象发生。半凹角蜂窝胞元破坏形式是：结构两端

同时形成塑性铰, 与其零泊松比特性密切相关; 其次胞壁被压缩密实。当冲击速度较低时, 在冲击端变形带传向固定端过程中, 部分胞元内凹端较凸出端提前形成塑性铰, 试件局部不均匀变形造成试件右部收缩, 产生失稳现象。



(a) v=35 m/s



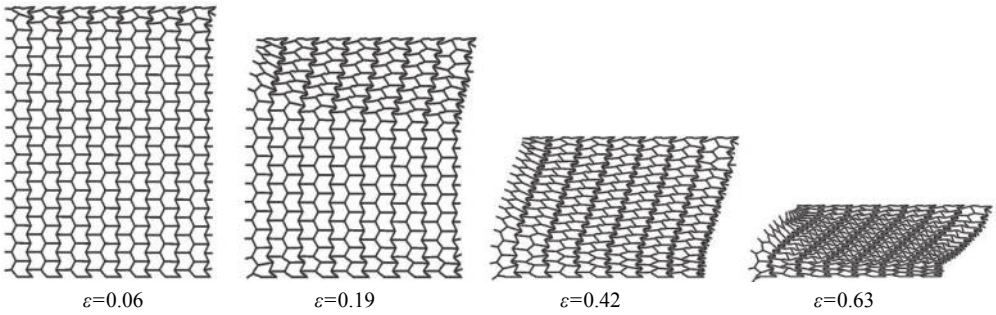
(b) v=70 m/s

图 4　不同冲击速度下凹角蜂窝的变形模式

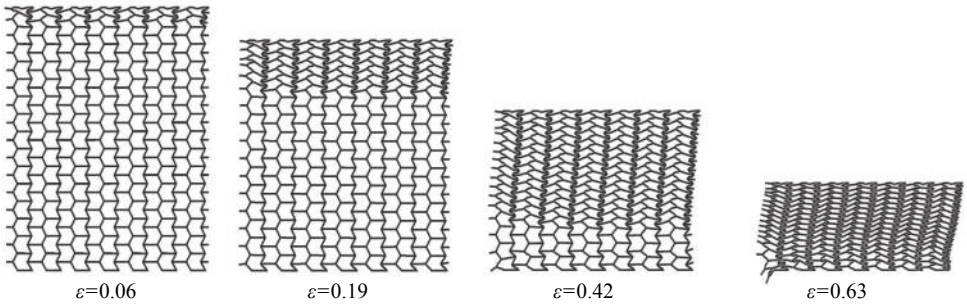
Fig. 4　Deformation modes of re-entrant honeycombs under different impact velocities

与图 5(a)中蜂窝结构几何参数相同, 图 5(b)和图 5(c)分别给出了半凹角蜂窝结构在中高速冲击下的变形模式。当刚性板冲击蜂窝试件速度 v=35 m/s, 冲击端周围的胞元首先被破坏并压缩密实, 随后更多的胞元进入密实区, 变形带呈“I”型, 逐层传递至固定端。与低速冲击下蜂窝试件的变形模式类似, 在“I”型变形带传向固定端的过程中, 底层胞元被压溃, 但无失稳现象。图中显见, 半凹角蜂窝结构并没有出现与正六边形蜂窝结构类似的“V”型剪切变形带, 结合上文可知, 出现此现象的原因是半凹角蜂窝的零泊松比效应使其纵向被压缩时, 横向尺寸不发生变化, 试件整体均匀变形。当刚性板冲击速度 v=70 m/s, 试件变形集中在冲击端, 而固定端附近胞元没有发生破坏, 变形带呈“I”型。与正六边形蜂窝、凹角蜂窝相同, 此时惯性对结构变形起主导作用, 试件变形带的传播表现为冲击波形式, 逐层传递至固定端, 直到整个试件被压缩密实。与正六边形蜂窝、凹角蜂窝不同的是, 其零泊松比特征使其在不同冲击速度下变形带形式均以“I”型为主, 且其横向尺寸不会发生变化。由于半凹角蜂窝的零泊松比特性与其构型特征关联密切, 而与结构几何参数关联不大, 因此半凹角蜂窝的面内变形模式与冲击速度和结构几何参数无关, 主要依赖于其零泊松比特征, 且变形更加均匀, 从而进一步为智能飞行器蒙皮设计提供了构型参考。

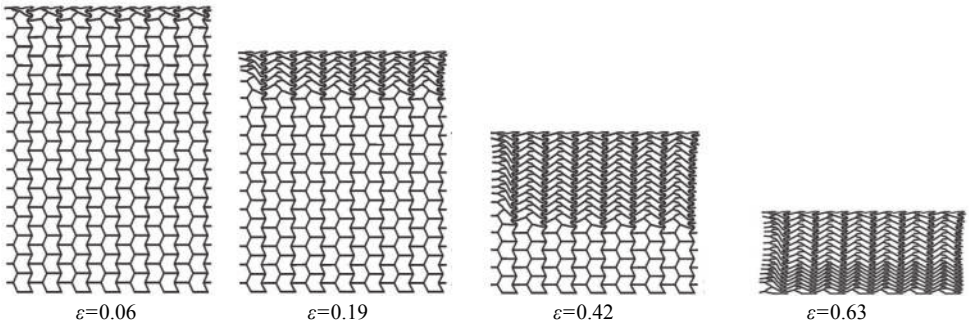
为了分析壁厚和冲击速度对半凹角蜂窝结构抗冲击性能的影响, 在其他条件相同的情况下, 图 6 和图 7 分别给出了不同冲击速度、不同胞壁厚度下, 半凹角蜂窝结构的名义应力-应变曲线。与正六边形蜂窝结构相同, 半凹角蜂窝结构的面内动态响应可分为 3 个部分: 弹性阶段、平台区和密实化阶段。当刚性板以恒定速度冲击蜂窝试件时, 试件应力在极短时间内达到初始峰值; 随后, 试件应力逐渐减小并围绕一固定值上下波动, 此阶段即为平台区, 为吸收能量的主要阶段, 对蜂窝结构的抗冲击性能至关重要; 最后, 试件开始密实化, 在应变变化很小的情况下蜂窝应力急剧上升。显而易见, 在胞壁厚度相同的情况下, 蜂窝结构的平台应力随着冲击速度的增加而变大(见图(6)), 其原因为冲击速度越大, 蜂窝结构吸收的能量越多, 相应地平台应力也会随之变大; 在相同冲击速度情况下, 蜂窝结构的平台应力



(a) v=10 m/s



(b) v=35 m/s



(c) v=70 m/s

图 5　不同冲击速度下半凹角蜂窝结构的变形模式

Fig. 5　Deformation modes of semi re-entrant honeycombs under different impact velocities

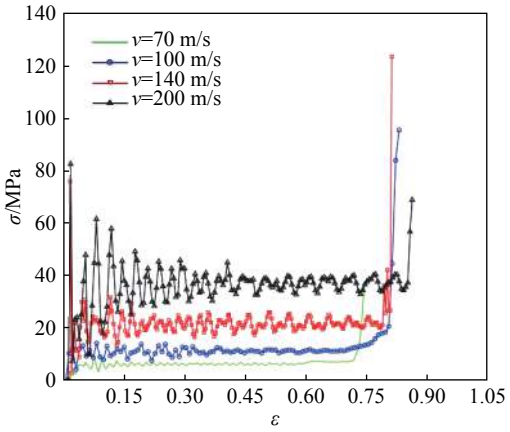


图 6　不同冲击速度下半凹角蜂窝的名义应力-应变曲线(h=0.5 mm)

Fig. 6　Nominal stress-strain curves of semi re-entrant honeycombs under different impact velocities (h=0.5 mm)

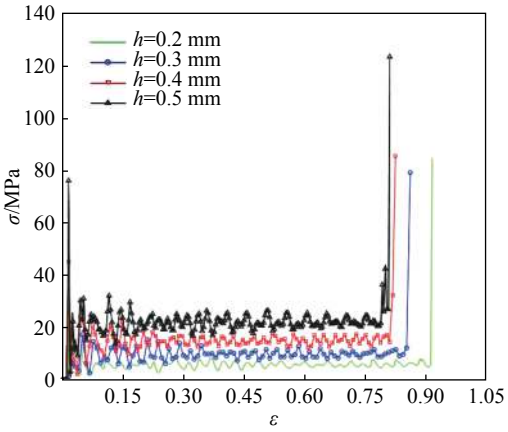


图 7　不同胞壁厚度下半凹角蜂窝的名义应力-应变曲线(v=140 m/s)

Fig. 7　Nominal stress-strain curves of semi re-entrant honeycombs under different cell wall thicknesses (v=140 m/s)

随着胞壁厚度的增加而变大(见图(7)),这可以理解为壁厚增加造成胞壁两端塑性铰在形成过程中吸收的能量变多,最终导致平台应力变大。因此,在不同的冲击速度下,对半凹角蜂窝结构的胞壁厚度进行设计,可以得到不同的抗冲击性能。

2.2　平台应力解析结果

根据半凹角蜂窝结构在高速($v \geqslant 70$ m/s)冲击下的变形模式,即局部变形带以"I"型逐层传递至固定端,类似于冲击波在连续体内的传播。所以,通过将蜂窝结构看作理想刚塑性模型,利用一维冲击波理论,可得蜂窝材料在动态荷载作用下的抗压强度公式[19]

$$\sigma_{\mathrm{d}} = \sigma_0 + \frac{\rho^*}{\varepsilon_{\mathrm{d}}} v^2 = \sigma_0 + A v^2 \tag{6}$$

式中: σ_{d}、σ_0分别为动态荷载作用下的抗压强度和准静态抗压强度,ρ^*为蜂窝基体材料的密度,ε_{d}为蜂窝材料的锁定应变,v 为冲击速度,A 为无量纲参数。

由于蜂窝结构的周期性特征,可以取部分代表性胞元结构进行分析,如图 8 所示。代表性胞元尺寸大小: $L_0 = 2s = 4l$, $H_0 = 4l\cos\theta$。图 9(a)和图 9(b)分别表示代表性胞元压溃初始时刻和结束时刻的变形模式。基于半凹角蜂窝的零泊松比特征,可以认为代表性胞元在整个压溃过程中 L_0 大小不变。

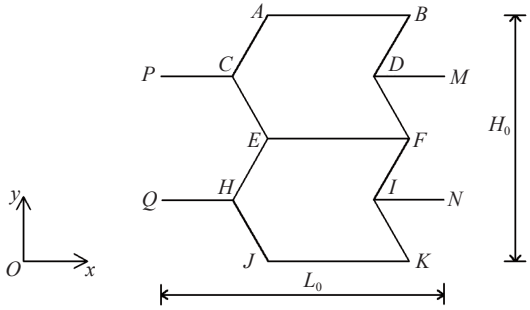


图 8　代表性胞元

Fig. 8　Representative basic cell

当$t = t_0$时,胞壁 AB 已经成为致密化区域中的一部分,点 A、B 处的速度等于 v,而在整个压溃过程中,点 Q、H、I、N、J、K 几乎没有发生移动,即

$$\dot{P}_{EH} = \dot{P}_{FI} = \dot{P}_{QH} = \dot{P}_{HJ} = \dot{P}_{IN} = \dot{P}_{IK} = \dot{P}_{JK} = 0 \tag{7}$$

式中: $\dot{P}$表示胞壁的动量。

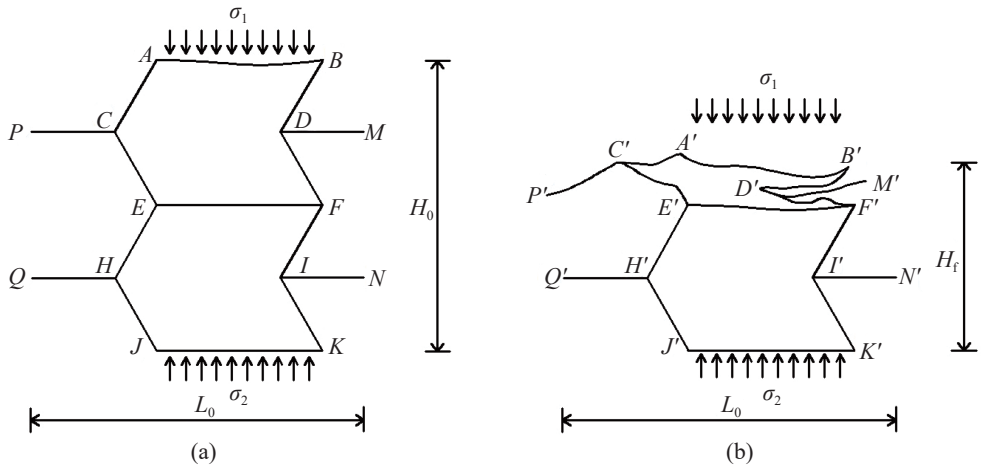


图 9　压溃初始时刻(t_0)和结束时刻(t_{f})蜂窝变形模式

Fig. 9　Deformation modes at the initial (t_0) and final moments (t_{f}) of crushing

当$t = t_{\mathrm{f}}$时,胞壁 AB、AC、BD、CE、CP、DM、DF、EF 形成了新的致密化区域,即胞壁$A'B'$、$A'C'$、$B'D'$、$C'E'$、$C'P'$、$D'M'$、$D'F'$、$E'F'$,如图 9(b)所示。这些胞壁的动量变为

$$\dot{P}_{A'C'} = \dot{P}_{B'D'} = \dot{P}_{C'E'} = \dot{P}_{C'P'} = \dot{P}_{D'M'} = \dot{P}_{D'F'} = \rho_{\mathrm{s}} bhlv, \quad \dot{P}_{A'B'} = \dot{P}_{E'F'} = 2\rho_{\mathrm{s}} bhlv \tag{8}$$

基于蜂窝结构的周期性,因此代表性胞元的胞壁动量满足下列关系

$$\dot{P}_{AB}=\dot{P}_{E'F'},\quad \dot{P}_{AC}=\dot{P}_{E'H'},\quad \dot{P}_{BD}=\dot{P}_{F'I'},\quad \dot{P}_{CE}=\dot{P}_{H'J'} \tag{9}$$

$$\dot{P}_{CP}=\dot{P}_{H'Q'},\quad \dot{P}_{DF}=\dot{P}_{I'K'},\quad \dot{P}_{DM}=\dot{P}_{I'N'},\quad \dot{P}_{EF}=\dot{P}_{J'K'}。 \tag{10}$$

基于线性动量定理，在时间间隔(t_0, t_f)内，可得如下方程

$$\begin{aligned}bL_0\int_{t_0}^{t_f}(\sigma_1-\sigma_2)\mathrm{d}t=&(\dot{P}_{A'B'}+\dot{P}_{A'C'}+\dot{P}_{B'D'}+\dot{P}_{C'E'}+\dot{P}_{C'P'}+\dot{P}_{D'M'}+\dot{P}_{D'F'}+\dot{P}_{E'F'}+\dot{P}_{E'H'}+\\&\dot{P}_{H'J'}+\dot{P}_{Q'H'}+\dot{P}_{F'I'}+\dot{P}_{I'K'}+\dot{P}_{I'N'}+\dot{P}_{J'K'})-(\dot{P}_{AB}+\dot{P}_{AC}+\dot{P}_{BD}+\dot{P}_{CE}+\dot{P}_{CP}+\dot{P}_{DM}+\dot{P}_{DF}+\\&\dot{P}_{EF}+\dot{P}_{EH}+\dot{P}_{HJ}+\dot{P}_{QH}+\dot{P}_{FI}+\dot{P}_{IK}+\dot{P}_{IN}+\dot{P}_{JK})\end{aligned} \tag{11}$$

(11) 式进一步简化为

$$bL_0\int_{t_0}^{t_f}(\sigma_1-\sigma_2)\mathrm{d}t=(\dot{P}_{A'B'}+\dot{P}_{A'C'}+\dot{P}_{B'D'}+\dot{P}_{C'E'}+\dot{P}_{C'P'}+\dot{P}_{D'M'}+\dot{P}_{D'F'})=2\rho_s bhsv+4\rho_s bhlv \tag{12}$$

因为正在坍塌的变形带和固定端之间的胞壁没有发生破坏[8]，所以$\sigma_2\leqslant\sigma_0$。当$s=2l$时

$$\int_{t_0}^{t_f}\sigma_1\mathrm{d}t=\int_{t_0}^{t_f}\sigma_2\mathrm{d}t+\frac{8\rho_s hlv}{L_0} \tag{13}$$

式中：$t_f-t_0=\dfrac{H_0-H_f}{v}=\dfrac{2l\cos\theta-4h}{v}$。(13) 式两边同时除以$t_f-t_0$，可得蜂窝材料在一个压溃周期内的平台应力$\sigma_d$，表示为

$$\sigma_d=\sigma_0+\frac{h}{l}\frac{2\rho_s}{\sqrt{3}-4\left(\dfrac{h}{l}\right)}v^2 \tag{14}$$

类似地，可以得到正六边形蜂窝与凹角蜂窝的平台应力计算公式[8, 17]

$$\sigma_{d,\,\mathrm{hexagon}}=\sigma_0+\frac{h}{l}\frac{6\rho_s}{3\sqrt{3}-8\left(\dfrac{h}{l}\right)}v^2 \tag{15}$$

$$\sigma_{d,\,\mathrm{re\text{-}entrant}}=\sigma_0+\frac{h}{l}\frac{16\rho_s}{7\sqrt{3}-28\left(\dfrac{h}{l}\right)}v^2 \tag{16}$$

本研究中准静态抗压强度取值为：$\sigma_0=\dfrac{2}{3}\left(\dfrac{h}{l}\right)^2\sigma_{ys}$。

与文献 [8] 中的正六边形蜂窝结构平台应力的理论公式类似，半凹角蜂窝结构平台应力的理论公式包括两部分：蜂窝结构在准静态情况下的抗压强度和结构本身的惯性效应导致的强度增加项。表 2 给出了在不同胞壁厚度、不同冲击速度情况下，半凹角蜂窝结构平台应力的理论值和有限元结果。可以发现，其相对误差均小于 10%。

如前所述，正六边形蜂窝、凹角蜂窝和半凹角蜂窝分别对应正泊松比、负泊松比和零泊松比力学特征。根据 3 种蜂窝结构平台应力的理论公式，图 10 给出了在相同壁厚时，3 种蜂窝结构的平台应力在不同冲击速度下的变化曲线。从图 10 可以看出，零泊松比蜂窝的平台应力介于正泊松比蜂窝和负泊松比蜂窝之间，而出现这种结果的主要原因是蜂窝结构的构型差异。图 11 显示了半凹角蜂窝结构在纵向受压时的应力云图。可见，半凹角蜂窝的应力主要集中在内凹端塑性铰，结构中其他部分应力分布均匀。随着蜂窝持续被压缩，内凹端塑性铰处应力不断增大，而其他部分应力变化很小。这主要是因为胞元内凹端处收缩，造成接触面积减小，而冲击力保持不变，因此平台应力增大，凸出端则与此相反。综上可知，半凹角蜂窝兼具正泊松比蜂窝和负泊松比蜂窝的构型特征。半凹角蜂窝的平台应力较正六边形蜂窝得到增强，且局部变形带以“I”型为主。半凹角蜂窝胞元由于凸出端受压延伸，节点塑性铰的形成与正六边形蜂窝类似，故其平台应力较凹角蜂窝又有所减小。多孔结构的抗冲击性能与平台应力密切相关。因此，在相同条件下半凹角蜂窝结构的抗冲击性能优于正六边形蜂窝，较凹角蜂窝有所弱化。

表 2　半凹角蜂窝结构的平台应力

Table 2　Plateau stress of the semi re-entrant honeycombs

h/mm	v/(m·s^{-1})	Average crushing strength/MPa		Deviation/%
		Theoretical	Numerical	
0.2	70	1.643	1.555	5.36
	100	2.788	2.850	2.22
	140	5.738	5.967	3.99
	200	11.421	11.551	1.14
0.3	70	2.910	3.180	9.28
	100	5.287	5.340	0.99
	140	9.761	9.012	7.67
	200	19.268	20.181	4.74
0.4	70	4.553	4.810	5.64
	100	8.134	8.222	1.08
	140	14.875	13.608	8.52
	200	29.200	28.769	1.48
0.5	70	6.682	7.170	7.30
	100	11.828	12.991	9.83
	140	21.514	21.545	0.14
	200	42.097	40.774	3.14

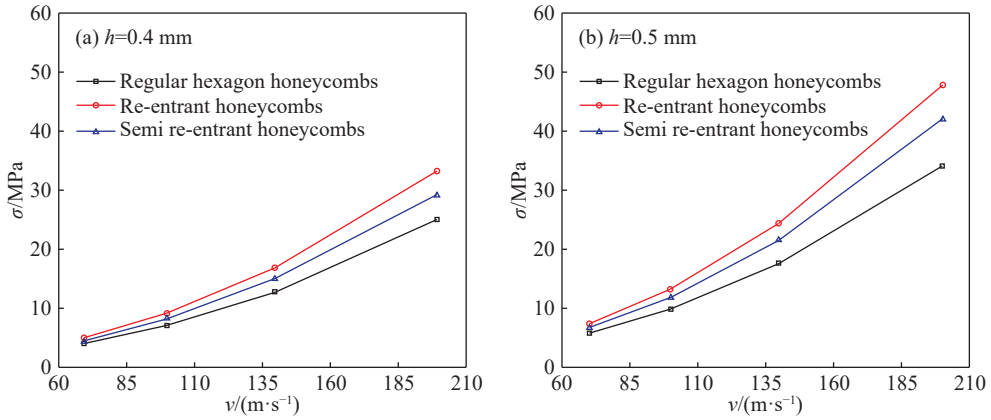
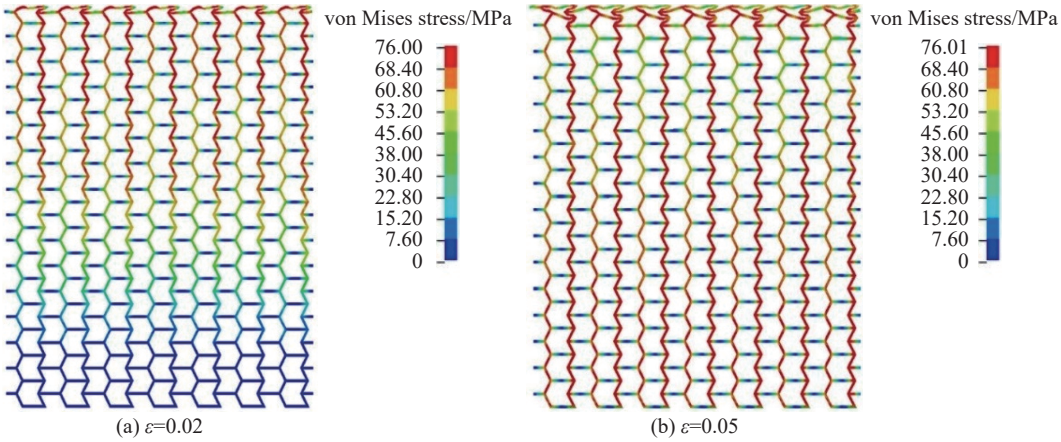


图 10　3 种蜂窝结构的冲击速度-平台应力曲线

Fig. 10　Impact velocity versus plateau stress curves of three types of honeycombs



(a) ε=0.02　　(b) ε=0.05

图 11　半凹角蜂窝的应力云图(h=0.5 mm, v=70 m/s)

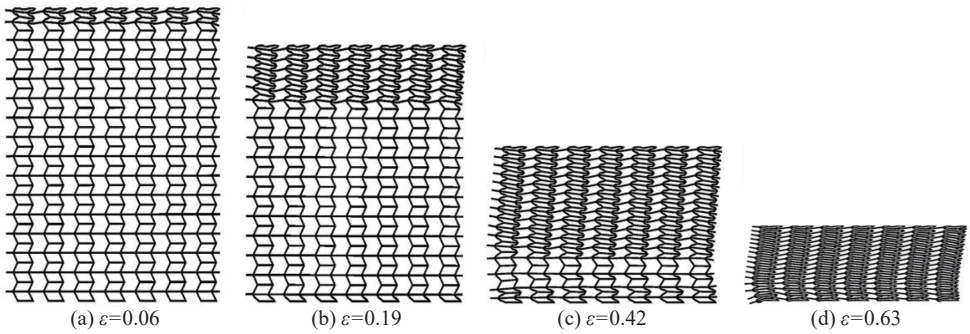
Fig. 11　Stress contours of semi re-entrant honeycombs (h=0.5 mm, v=70 m/s)

3　不同构型零泊松比蜂窝动态特性

在以上研究的基础上，采用相同的模型参数，通过在半凹角蜂窝内部增加直杆的方式，得到一种新型零泊松比蜂窝结构，以下简称为新型半凹角蜂窝，从而提高了半凹角蜂窝的抗冲击性能。其中，新型半凹角蜂窝内部直杆厚度与蜂窝其余杆件厚度相同。

图 12 显示了新型半凹角蜂窝在冲击速度 v=35 m/s 时的变形模式。可以发现，与半凹角蜂窝变形模式相同，其变形带呈“I”型，逐层传递至固定端，并且蜂窝在压缩过程中的横向尺寸没有发生变化，从而验证了新型半凹角蜂窝的零泊松比特性。观察图 13 和图 14 可知，新型半凹角蜂窝的平台应力高于半凹角蜂窝，且接近于凹角蜂窝。通过比较两种零泊松比蜂窝的构型特征，并结合一维冲击波理论，采用与第 2.2 节类似的方法可得新型零泊松比蜂窝的平台应力理论公式

$$\sigma_{\mathrm{d}}=\sigma_0+\frac{h}{l}\frac{2.5\rho_{\mathrm{s}}}{\sqrt{3}-4\left(\dfrac{h}{l}\right)}v^2 \tag{17}$$



(a) ε=0.06　(b) ε=0.19　(c) ε=0.42　(d) ε=0.63

图 12　新型半凹角蜂窝的变形模式（h=0.5 mm, v=35 m/s）

Fig. 12　Deformation modes of novel semi re-entrant honeycombs (h=0.5 mm, v=35 m/s)

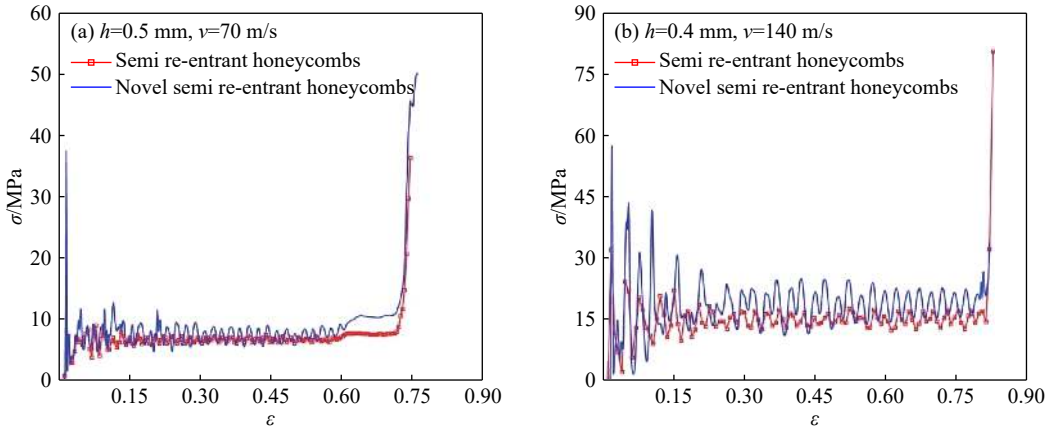


图 13　半凹角蜂窝与新型半凹角蜂窝的名义应力-应变曲线

Fig. 13　Nominal stress-strain curves of semi re-entrant honeycombs and novel semi re-entrant honeycombs

图 15 分别给出了 3 种蜂窝的平台应力随冲击速度和胞壁厚度变化的曲线。可以发现，新型半凹角蜂窝的平台应力高于半凹角蜂窝和凹角蜂窝。随着冲击速度或胞壁厚度增加，新型半凹角蜂窝较半凹角蜂窝的平台应力优势也愈加明显。蜂窝结构的抗冲击能力与平台应力密切相关。相同条件下，平台应力越高，吸收的能量越多，抗冲击性能也越强。新型半凹角蜂窝纵向被压缩时，胞元内部直杆使其两端形成的塑性铰得到加强，进而造成塑性铰吸收的能量增多，且胞元整体厚度较半凹角蜂窝也有所

提高, 最终导致其平台应力增加。因此, 该结构设计可以提高半凹角蜂窝的抗冲击性能, 也为其他结构优化设计提供一定的理论参考。

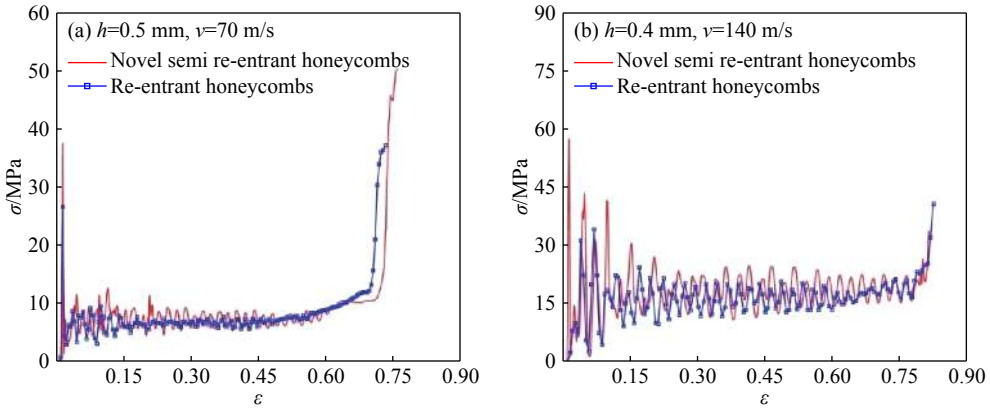


图 14　新型半凹角蜂窝与凹角蜂窝的名义应力-应变曲线

Fig. 14　Nominal stress-strain curves of novel semi re-entrant honeycombs and re-entrant honeycombs

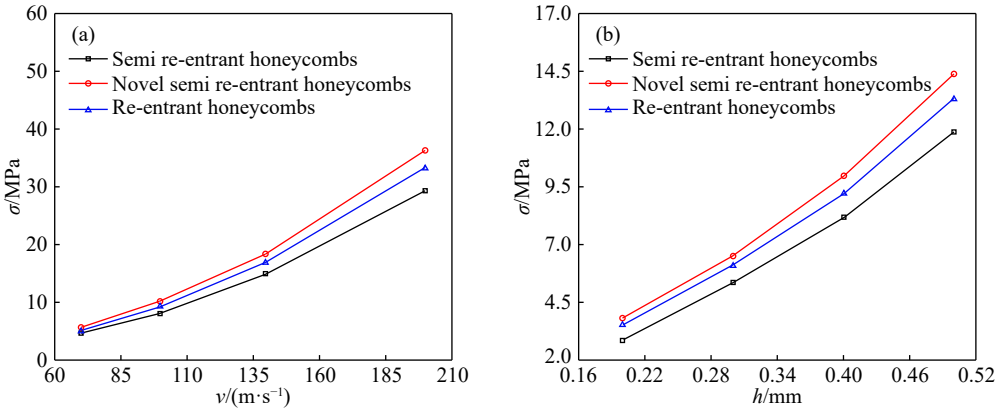


图 15　3 种蜂窝结构的 (a) 冲击速度-平台应力曲线(h=0.4 mm)和 (b) 胞壁厚度-平台应力曲线(v=100 m/s)

Fig. 15　Impact velocity (a) and cell wall thickness (b) versus plateau stress curves of three types of honeycombs (v=100 m/s)

4　结　论

以半凹角蜂窝为主要研究对象, 对比分析了 3 种蜂窝结构在动态冲击荷载作用下的变形模式和抗冲击性能。

(1)半凹角蜂窝结构在冲击荷载作用下的变形模式主要依赖于零泊松比特性, 变形带以“I”型为主。在低速冲击下, 半凹角蜂窝结构伴有失稳现象发生。

(2)根据一维冲击波理论, 推导了在高速冲击荷载作用下半凹角蜂窝结构的平台应力理论公式, 并与有限元结果进行对比, 分析验证了该理论公式的准确性。此外, 在相同的壁厚条件下, 通过对比 3 种蜂窝结构在不同冲击速度下的平台应力, 发现半凹角蜂窝的抗冲击性能介于正六边形蜂窝和凹角蜂窝之间, 其力学机理归因于蜂窝结构不同的几何构型。

(3)通过在半凹角蜂窝内部增加直杆, 得到一种新型零泊松比蜂窝, 其抗冲击性能较半凹角蜂窝得到加强, 且接近于凹角蜂窝, 可为其他结构优化设计提供一定的理论参考。

参考文献：

[1] ZHANG Q C, YANG X H, LI P, et al. Bioinspired engineering of honeycomb structure—using nature to inspire human innovation [J]. Progress in Materials Science, 2015, 74: 332–400.

[2] BITZER T. Honeycomb technology: materials, design, manufacturing, applications and testing [M]. New York: Springer Science & Business Media, 1997.

[3] GRIMA J N, OLIVERI L, ATTARD D, et al. Hexagonal honeycombs with zero poisson's ratios and enhanced stiffness [J]. Advanced Engineering Materials, 2010, 12(9): 855–862.

[4] NEVILLE R M, MONTI A, HAZRA K, et al. Transverse stiffness and strength of Kirigami zero-*v* peek honeycombs [J]. Composite Structures, 2014, 114(1): 30–40.

[5] 程文杰, 周丽, 张平, 等. 零泊松比十字形混合蜂窝设计分析及其在柔性蒙皮中的应用 [J]. 航空学报, 2015, 36(2): 680–690.
CHENG W J, ZHOU L, ZHANG P, et al. Design and analysis of a zero poisson's ratio mixed cruciform honeycomb and its application in flexible skin [J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2015, 36(2): 680–690.

[6] HUANG J, GONG X B, ZHANG Q H, et al. In-plane mechanics of a novel zero poisson's ratio honeycomb core [J]. Composites Part B: Engineering, 2016, 89: 67–76.

[7] PAPKA S D, KYRIAKIDES S. In-plane compressive response and crushing of honeycomb [J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 1994, 42(10): 1499–1532.

[8] HU L L, YU T X. Dynamic crushing strength of hexagonal honeycombs [J]. International Journal of Impact Engineering, 2010, 37(5): 467–474.

[9] RUAN D, LU G, WANG B, et al. In-plane dynamic crushing of honeycombs—a finite element study [J]. International Journal of Impact Engineering, 2003, 28(2): 161–182.

[10] HU L L, YOU F F, YU T X. Effect of cell-wall angle on the in-plane crushing behaviour of hexagonal honeycombs [J]. Materials & Design, 2013, 46(4): 511–523.

[11] HU L L, YU T X. Mechanical behavior of hexagonal honeycombs under low-velocity impact—theory and simulations [J]. International Journal of Solids and Structures, 2013, 50(20/21): 3152–3165.

[12] HONG S T, PAN J, TYAN T, et al. Dynamic crush behaviors of aluminum honeycomb specimens under compression dominant inclined loads [J]. International Journal of Plasticity, 2008, 24(1): 89–117.

[13] PRAWOTO Y. Seeing auxetic materials from the mechanics point of view: a structural review on the negative poisson's ratio [J]. Computational Materials Science, 2012, 58: 140–153.

[14] 卢子兴, 王欢, 杨振宇, 等. 星型-箭头蜂窝结构的面内动态压溃行为 [J]. 复合材料学报, 2019, 36(8): 1893–1900.
LU Z X, WANG H, YANG Z Y, et al. In-plane dynamic crushing of star-arrowhead honeycomb structure [J]. Acta Materiae Compositae Sinica, 2019, 36(8): 1893–1900.

[15] 张新春, 刘颖, 李娜. 具有负泊松比效应蜂窝材料的面内冲击动力学性能 [J]. 爆炸与冲击, 2012, 32(5): 475–482.
ZHANG X C, LIU Y, LI N. In-plane dynamic crushing of honeycombs with negative poisson's ratio effects [J]. Explosion and Shock Waves, 2012, 32(5): 475–482.

[16] LIU W Y, WANG N L, GUO T, et al. In-plane dynamic crushing of re-entrant auxetic cellular structure [J]. Materials & Design, 2016, 100: 84–91.

[17] HOU X H, DENG Z C, ZHANG K. Dynamic crushing strength analysis of auxetic honeycombs [J]. Acta Mechanica Solida Sinica, 2016, 29(5): 490–501.

[18] CHEN Y, FU M H. Mechanical properties of a novel zero poisson's ratio honeycomb [J]. Advanced Engineering Materials, 2018, 20(2): 1700452.

[19] REID S R, PENG C. Dynamic uniaxial crushing of wood [J]. International Journal of Impact Engineering, 1997, 19(5/6): 531–570.

[20] GIBSON L J, ASHBY M F. Cellular solids: structure and properties [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.

Impact Resistance of Semi Re-Entrant Honeycombs under in-Plane Dynamic Crushing

CHEN Peng, HOU Xiuhui, ZHANG Kai

（*School of Mechanics*, *Civil Engineering and Architecture*, *Northwestern Polytechnical University*, *Xi'an* 710072, *China*）

Abstract: The semi re-entrant honeycombs presented unique deformation modes due to its characteristic of zero Poisson's ratio. The impact resistance of the semi re-entrant honeycombs under in-plane impact load was compared with that of the traditional positive Poisson's ratio (regular hexagon) honeycombs and negative Poisson's ratio (re-entrant) honeycombs, and the effects of zero Poisson's ratio on its dynamic performance were revealed. Given cellular geometric parameters (cell wall's aspect ratio), the deformation behaviors of three honeycomb configurations under different impact velocities were analyzed. It is concluded that dominant local deformation band of the semi re-entrant honeycomb is "I" type because of the zero Poisson ratio. According to the one-dimensional shock wave theory, a theoretical formula of the average dynamic crushing strength of semi re-entrant honeycombs was derived and compared with the finite element results to verify its effectiveness. Simultaneously, it was found that the impact resistance of semi re-entrant honeycombs was between regular hexagon honeycombs and re-entrant honeycombs. Therefore, a novel zero Poisson's ratio honeycomb was designed by adding a rib into every cell of the semi re-entrant honeycomb, and its impact resistance was improved. These results provide certain theoretical references for other structural optimization designs.

Keywords: semi re-entrant honeycombs; zero Poisson's ratio; in-plane impacting; crushing strength