

文章编号: 1001-1455(2007)06-0481-06

铈铌合金层裂行为的数值模拟*

江松青, 刘文韬

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

摘要: 采用一种唯象模型来模拟铈铌合金在高应变率条件下的变形行为, 该模型包括了材料的非线性弹性(状态方程)、率相关塑性和孔洞的形核及生长等多种效应。并且采用一种对角隐式 Runge-Kuta 方法来求解本构率方程组, 提高了热粘塑性本构关系计算的稳定性及精度。对 D. L. Tonks 等的铈铌合金平板撞击实验进行了数值模拟, 并将计算结果同文献中的实验和数值模拟结果进行了比较。结果表明, 本文的计算结果比文献中的数值模拟结果更接近有关实验数据。

关键词: 固体力学; 层裂; 率相关塑性; 铈铌合金; 高应变率; 孔洞; 平板撞击实验; 热粘塑性本构关系

中图分类号: O346.5

国标学科代码: 130 · 1540

文献标志码: A

1 引言

铈铌合金材料具有独特的性能, 如优良的延展性和抗侵蚀性能等。实验显示^[1-3], $w_{Nb} = 5\% \sim 8\%$ 的铈铌合金显示出形状记忆功能(效应)。在较高的温度下 ($T > 600\text{ K}$), $w_{Nb} = 6\%$ 的铈铌合金以稳定的体心立方 γ 相存在。当快速冷却至室温时, 合金发生相变。膨胀计测量实验显示^[2], 此相变属于剪切型相变, 不会引起材料密度发生变化, 但会产生相变诱导塑性。 α'' 相是亚稳态的, 当合金被加热或长期老化(如室温下保存几年), α'' 相将还原。老化材料表现出延性和抗腐蚀性能的下降(丧失)。

室温下单晶 α'' 相铈铌合金的初始晶体结构是随机的, 因此, 材料结构可以忽略, 而且材料拉伸和压缩响应之间的差别较小。当应变小于 0.3% 时, 材料的弹性响应可以观察到。当 α'' 相铈铌合金被加载到应变超过 0.3% 时, 材料的变形过程主要由连续的晶体再取向控制, 正如 X 射线和中子衍射实验所报道的^[4-5]。一些学者将这一过程也看作是材料发生屈服, 可能是不准确的。一旦重取向过程的极限应变被超过, 位错滑移机制将占主导地位(材料发生屈服)。当应变处于 0.3%~7% 之间时, 在非线性和卸载过程中可以得到适度的应变回复。铈铌合金的屈服强度随合金中铌元素成分接近于偏析体合成物而轻微变化。实验数据表明^[6-7], $w_{Nb} = 6\%$ 的铈铌合金的屈服强度比较低, 经过热处理后表现出超塑性。

本文中采用一种唯象模型来模拟 $w_{Nb} = 6\%$ 的铈铌合金(以下简称铈铌合金)在高应变率条件下的变形行为和损伤失效过程, 该模型包括材料的非线性弹性(状态方程)、率相关塑性和孔洞的形核及生长等多种效应, 并且采用一种对角隐式 Runge-Kuta 方法(DIRK)来求解本构率方程组, 提高热粘塑性本构计算的稳定性及精度。对文献[8]中所给的铈铌合金平板撞击实验进行数值模拟, 并将计算结果同文献中的实验和数值模拟结果进行比较。

2 延性金属材料的动态失效模型

2.1 基本假设与损伤定义

采用如下假设:

- (1) 材料是基体和微孔洞的组合物, 组合物是均匀、各向同性的, 可看作是连续介质。
- (2) 基体材料塑性不可压。

* 收稿日期: 2006-05-23

作者简介: 江松青(1969—), 男, 博士, 副研究员。

(3)引入孔隙度 f 、拉伸损伤 D_t 、剪切损伤 D_s 等概念。其中,拉伸损伤由孔隙度决定,他们之间的区别是:孔隙度可以扩大也可以缩小,但是拉伸损伤只能增大不能减小。剪切损伤与材料的偏塑性变形有关,和拉伸损伤一样,也只能增大不能减小。

2.2 状态方程

含孔洞材料的体模量 K 与基体材料的体模量 K_m 不同。采用 Mori-Tanaka 方法进行修正,可得到下列关系

$$\frac{K}{K_m} = 1 - \frac{f}{1 - \alpha(1 - f)} \quad (1)$$

$$\alpha = \frac{1}{1 + 4G_m/K_m}$$

于是,含孔洞材料的状态方程 p 可通过对基体材料的状态方程 p_m 进行修正后得到

$$p = \frac{K}{K_m} p_m \quad (2)$$

而基体材料的静水压力 p_m 可采用密实固体材料的 Mie-Gruneisen 状态方程描述

$$p_m = (\beta_1 \mu_m + \beta_2 \mu_m^2 + \beta_3 \mu_m^3)(1 - \gamma \mu_m/2) + \gamma(I - I_0) \quad (3)$$

密实固体材料的压缩比

$$\mu_m = \frac{1 - f_0}{1 - f}(1 + \mu) - 1 \quad (4)$$

比内能的演化方程

$$\dot{I} = \frac{-p\dot{\epsilon}_v + s_{ij}\dot{e}_{ij}}{1 + \mu} \quad (5)$$

2.3 率相关塑性

2.3.1 屈服面

采用 RDG 模型,包括材料硬化和软化效应,塑性势可以表述为

$$\phi = [2 + (1 - f)^2]J_2 + 3[1 - (1 - f)^2]p^2 - \delta(f)\bar{\sigma}_m^2 = 0 \quad (6)$$

式中: $\delta(f)$ 为基体材料强度的折减系数,与含孔洞材料的相对密度($\rho^* = 1 - f$)有关,且满足以下条件:

(1)当 $\rho^* = 1$ 时, $\delta(f) = 1$ 。表示此时材料无微孔洞损伤,其强度等于基体材料的强度。

(2)当 $\rho^* = \rho_{cr}^*$ 时, $\delta(f) = 0$ 。表示在临界相对密度处(即微孔洞损伤达到临界值时),材料将丧失机械强度。

2.3.2 塑性应变率

采用相关流动法则,并且假设多孔材料的总塑性功与基体材料的塑性功相等(即 $(1 - f)\bar{\sigma}_m\dot{\epsilon}_m^p = \sigma_{ij}\dot{\epsilon}_{ij}^p$),则含微孔洞损伤材料的粘塑性应变率可表示为

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = \frac{(1 - f)\bar{\sigma}_m\dot{\epsilon}_m^p}{(\partial\phi/\partial\sigma_{re})\sigma_{re}} \frac{\partial\phi}{\partial\sigma_{ij}} = \frac{(1 - f)\dot{\epsilon}_m^p}{2\delta(f)\sigma_m} \{ [2 + (1 - f)^2]s_{ij} + 2[1 - (1 - f)^2]p\delta_{ij} \} \quad (7)$$

2.3.3 基体材料本构模型

对于无孔洞的基体材料(密实固体),可采用 B-P 粘塑性模型

$$\begin{cases} \dot{\epsilon}_m^p = \frac{2}{\sqrt{3}}\dot{\epsilon}_0^p \exp\left[-\frac{n+1}{2n}\left(\frac{z}{\sigma_m}\right)^{2n}\right] \\ \dot{z} = m(z_1 - z_0)\dot{w}_p \\ \dot{w}_p = \sigma_{ij}\dot{\epsilon}_{ij}^p \\ m = m_0 + m_1 \exp(-\alpha w_p) \\ n = A + B/T \\ T = T_0 + \frac{I}{\rho_0 c_v} \end{cases} \quad (8)$$

或者采用 J-C 模型

$$\dot{\epsilon}_m^p = \dot{\epsilon}_0^p \max \left\{ \exp \left[\frac{1}{C} \left(\frac{\bar{\sigma}_m}{(A + B(\bar{\epsilon}_m^p)^n)(1 - (T^*)^m)} - 1 \right) \right], 0 \right\} \tag{9}$$

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_m - T_0}$$

2.4 延性失效和断裂判据

2.4.1 拉伸损伤的演化律

拉伸损伤与微孔洞有关,根据定义,有

$$D_t = \max \{ f \} \tag{10}$$

考虑到孔洞的形核效应,孔隙度的增长率方程为

$$\begin{cases} \dot{f} = \dot{f}_n + \dot{f}_g \\ \dot{f}_n = F_\sigma (\dot{\sigma}_m + \dot{p}) + F_\epsilon \dot{\epsilon}_m^p \\ \dot{f}_g = (1 - f) \dot{\epsilon}_v^p \end{cases} \tag{11}$$

式中

$$F_\sigma = \frac{f_1}{\sqrt{2\pi}s_1} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\sigma}_m + p - \sigma_N}{s_1} \right)^2 \right]$$

$$F_\epsilon = \frac{f_2}{\sqrt{2\pi}s_2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\bar{\epsilon}_m^p - \epsilon_N}{s_2} \right)^2 \right]$$

2.4.2 剪切损伤的演化律

剪切损伤演化与等效塑性应变率有关

$$\dot{D}_s = \begin{cases} 0 & \bar{\epsilon}_p < \epsilon_d \\ \frac{D_{sc} \dot{\epsilon}_p}{\epsilon_f - \epsilon_d} & \bar{\epsilon}_p \geq \epsilon_d \end{cases} \tag{12}$$

式中:临界断裂应变 ϵ_f 与应力三轴度、应变率和温度等因素有关

$$\epsilon_f = [D_1 + D_2 \exp(D_3 \sigma^*)] \left(1 + D_4 \ln \frac{\dot{\epsilon}_p}{\dot{\epsilon}_0} \right) (1 + D_5 T^*) \tag{13}$$

2.4.3 断裂判据

采用混合型断裂判据,则有

$$\left(\frac{D_t}{D_{tc}} \right)^2 + \left(\frac{D_s}{D_{sc}} \right)^2 \geq 1 \tag{14}$$

式中: D_{tc} 、 D_{sc} 分别为临界拉伸损伤和临界剪切损伤,是材料常数。

2.5 隐式求解方法

由于考虑了微孔洞的形核、生长和汇合,本构率方程组的刚性较大,如果采用显式求解,则时间步长必须取得很小才行,否则得不到稳定的收敛解。因此,本文中采用一种对角隐式 Runge-Kuta 方法(diagonally implicit Runge-Kutta,DIRK)对上述本构模型进行求解。

3 铀钕合金平板撞击实验的数值模拟

3.1 平板撞击实验参数

F. L. Addessio 等^[8]对如图 1 所示的铀钕合金平板撞击实验(z-cut 石英飞片撞击 $\omega_{NB} = 6\%$ 的铀钕合金靶板)进行了模拟,并给出了相应的结果,有关实验参数见表 1。

表 1 平板撞击实验参数

Table 1 Parameters of plate impact experiments

p/GPa	$v_t/(\text{m/s})$	h_f/mm	h_t/mm
2.84	223	4.075	2.55
4.25	328	4.081	2.52
5.50	419	4.078	2.53

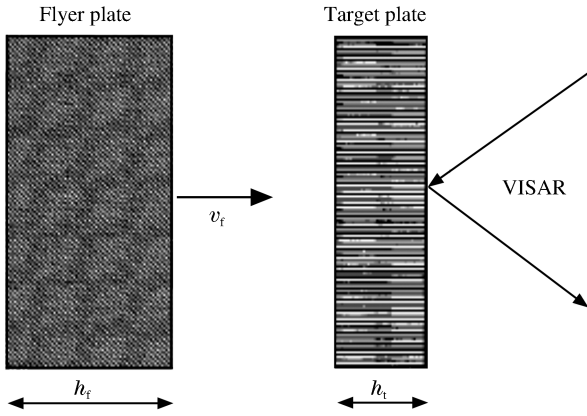


图 1 平板撞击实验示意图

Fig. 1 Schematic of plate impact experiment

3.2 数值模拟结果及分析

本文中对文献[8]中所给的铀钕合金平板撞击实验进行了数值模拟。图 2~7 给出了上述三种冲击速度下的自由面速度曲线以及孔隙度分布曲线,并与文献中的实验和数值模拟结果进行了比较。从图中可以看出:

(1)当冲击速度较低时,铀钕合金靶板并没有发生层裂(如图 2)。此时,从图 3 中可以看到,靶板中孔隙度增长较小(孔隙度峰值小于 0.015)。随着冲击速度的提高,可以观测到比较明显的层裂信号(如图 4、6),并且,靶板中层列面附近的孔隙度峰值超过了 0.2,这表明,材料损伤以拉伸损伤(即微孔洞损伤)为主。

(2)不论是数值模拟结果,还是实验数据,Hugoniot 弹性限(HEL)几乎观察不到,这是因为在加载过程中,铀钕合金发生了晶体重取向现象^[8]。

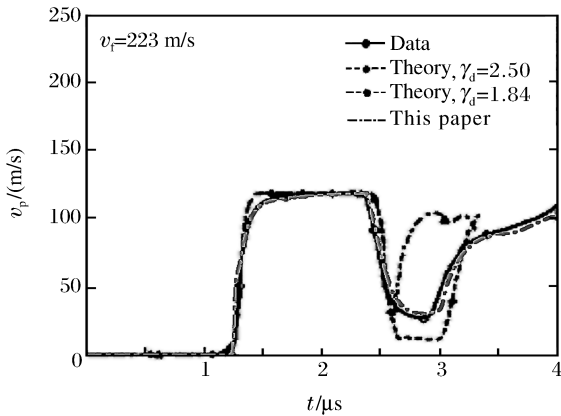


图 2 自由面速度曲线比较

Fig. 2 Comparisons of free-surface velocities between simulations and experimental data

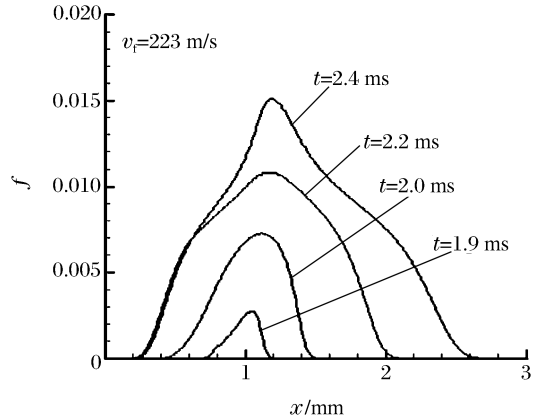


图 3 孔隙度分布

Fig. 3 Porosity distribution

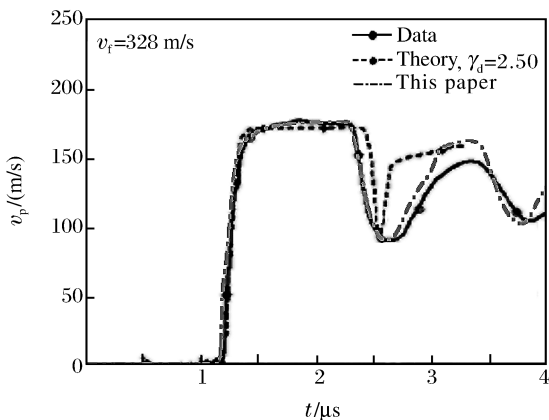


图 4 自由面速度曲线比较

Fig. 4 Comparisons of free-surface velocities between simulations and experimental data

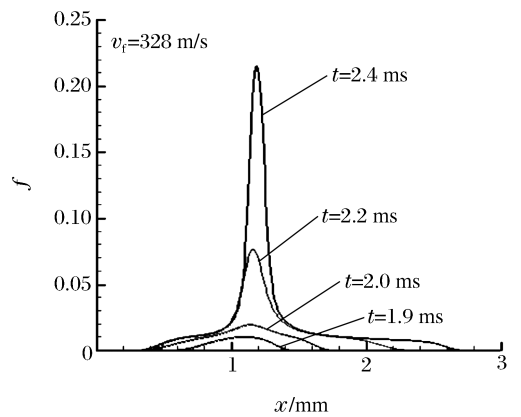


图 5 孔隙度分布

Fig. 5 Porosity distribution

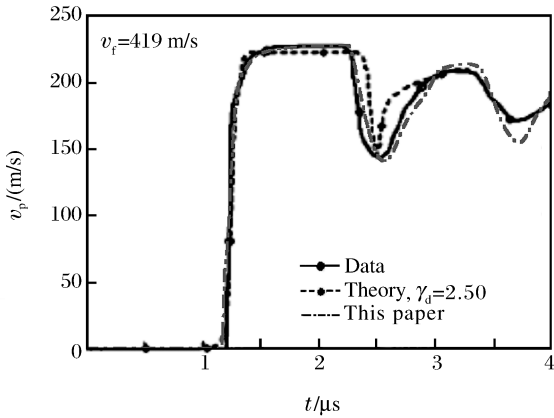


图 6 自由面速度曲线比较

Fig. 6 Comparisons of free-surface velocities between simulations and experimental data

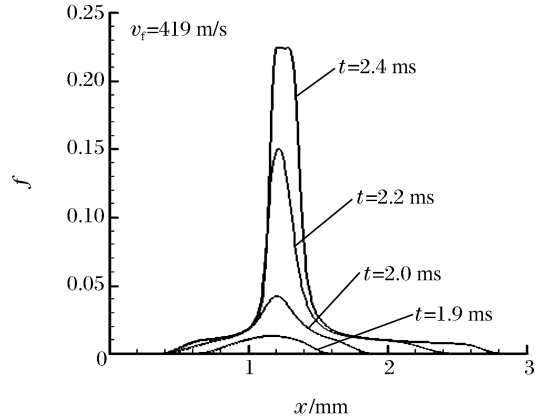


图 7 孔隙度分布

Fig. 7 Porosity distribution

(3) 铀钕合金的回拉(pull-back)信号前沿上升较缓,回拉区(pull-back region)较宽($2.5 \mu s < t < 2.7 \mu s$),这表明,铀钕合金的失效响应时间相对较长,从材料开始出现损伤到最终发生层裂,有一个明显的发展过程。

从数值模拟结果与实验数据的比较来看,本文的数值模拟结果比文献中的数值模拟结果更接近实验数据。具体表现在下列方面:

(1) 在卸载段,本文的结果比文献中的结果更接近实验数据。

(2) 文献[8]中数值模拟结果的回拉信号前沿上升太陡峭,回拉区太窄,和实验数据相差较多,而本文的结果则大有改善,和实验数据比较接近。

(3) 本文的层裂信号振荡周期和实验数据比较接近,这表明铀钕合金靶板发生层裂的位置可能和实验结果差不多。而文献中则没有给出相关的数值模拟结果。

本文的数值模拟结果比文献中的结果更接近实验数据的原因可能是:

(1) 本文的本构模型考虑了微孔洞的形核效应,微孔洞的增长率更接近于实际情况;

(2) 本文中采用了率相关的失效模型,使得材料失效响应时间更长一些。

4 结 论

采用一种唯象模型来模拟铀钕合金在高应变率条件下的变形行为和损伤失效过程,该模型包括了材料的非线性弹性(状态方程)、率相关塑性和孔洞的形核及生长等多种效应,并且采用一种对角隐式 Runge-Kuta 方法来求解本构率方程组,提高了热粘塑性本构计算的稳定性及精度。为了考察模型的有效性和适应性,对文献[8]中所给的铀钕合金平板撞击实验进行了数值模拟,并将计算结果同文献中的实验和数值模拟结果进行了比较。结果表明,本文的计算结果比文献中的数值模拟结果更接近有关实验数据。

感谢周洪强博士提供相关文献资料。

参考文献:

[1] Vandermeer R A. Phase transformations in a uranium +14 at. % niobium alloy[J]. Acta Metallurgica, 1980,28: 383-393.

[2] Vandermeer R A, Ogle J C, Snyder W B. Shape memory effects in a uranium +14 at. % niobium alloy[J]. Scripta Metallurgica, 1978,12(3):243-248.

[3] Vandermeer R A, Ogle J C, Northcutt W G. A phenomenological study of the shape memory effect in polycrystalline uranium-niobium alloys[J]. Metallurgical and Materials Transactions: A, 1981,12(5):733-741.

- [4] Field R D, Thoma D J, Dunn P S, et al. Martensitic structures and deformation twinning in the U-Nb shape-memory alloys[J]. *Philosophical Magazine: A*, 2001,81(7):1691-1724.
- [5] Brown D W, Bourke M A M, Dunn P S, et al. Uniaxial tensile deformation of uranium 6wt pct niobium: A neutron diffraction study of deformation twinning[J]. *Metallurgical and Materials Transactions: A*, 2001,32(9):2219-2228.
- [6] Ludtka G M, Oakes R E, Mackiewicz-ludtka G, et al. An investigation of superplasticity in a thermomechanically processed U-6Nb($\alpha+\gamma_2$) alloy[J]. *Metallurgical Transactions: A*, 1993,24:379-388.
- [7] Rosen R S, Kassner M E, Thiehsen K E. The mechanical behaviour of U-6Nb alloy and AISI 1045 and 1215 steels at high strain rates[J]. *Journal of Materials Science Letter*, 1992,11:125-128.
- [8] Addressio F L, Zuo Q H, Masson T A, et al. Model for high-strain-rate deformation of uranium-niobium alloys[J]. *Journal of Applied Physics*, 2003,93(12):9644-9654.

Numerical modeling of spall fracture behavior in U-Nb alloys

JIANG Song-qing*, LIU Wen-tao

(*Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

Abstract: A phenomenological model, including nonlinear elasticity (equation of state), rate-dependent plasticity, and void nucleation and growth, was proposed to simulate deformations of U-6%Nb alloy under the condition of high strain rate. The diagonally implicit Runge-Kutta (DIRK) method was used to solve the constitutive rate equations, and stability and accuracy of the solution to thermovisco-plastic constitutive relations were improved. The proposed model was used to simulate the plate impact experiments on U-6%Nb alloy by Tonks D L, et al. Calculated results by the proposed model are in better agreement with the experimental data than the simulated results by Addressio F L, et al.

Key words: solid mechanics; spall fracture; rate-dependent plasticity; U-6%Nb alloy; high strain rate; void; plate impact experiment; thermoviscoplastic constitutive relation

* Corresponding author: JIANG Song-qing
E-mail address: jsqing@mail.iapcm.ac.cn
Telephone: 86-10-62014411-2623