DOI: 10.11883/bzycj-2020-0467

延性金属层裂自由面速度曲线特征 多尺度模拟研究^{*}

王云天1,曾祥国1,陈华燕1,杨 鑫2,王 放3,祁忠鹏3

(1. 四川大学建筑与环境学院,深地科学与工程教育部重点实验室,四川 成都 610065;

2. 成都理工大学环境与土木工程学院,地质灾害防治与地质环境保护国家重点实验室 四川 成都 610059;

3. 西南大学材料与能源学院, 重庆 400715)

摘要: 以延性金属钽为研究对象,对钽在平板撞击下的层裂行为进行了多尺度下的数值模拟研究,从微观视角对 自由面速度曲线上的典型特征进行了新的解读。在宏观尺度,对比分析了光滑粒子流体动力学法(smootfied particle hydrodynamics, SPH)与 Lagrange 网格法以及几种本构模型的模拟结果及其适用性。通过与实验数据的对比表明, Steinberg-Cochran-Guinan本构模型在层裂模拟中与实验数据吻合较好,通过改变加载条件获得了不同应变率下的自由 面速度曲线,分析了不同应变率下的自由面速度曲线中的典型特征。在微观尺度,采用分子动力学方法获得层裂区域 内损伤演化情况,揭示了宏观尺度自由面速度曲线典型特征所蕴含的物理内涵。分析表明,层裂表现为材料内部微孔 洞形核、长大和聚集的损伤演化过程,自由面速度曲线上的典型特征与层裂区域的损伤演化过程存在密切关联。 Pullback 信号是层裂区域内微孔洞形核的宏观表征;自由面速度曲线的下降幅值在一定程度上反映了微孔洞的形核条 件,由此计算得到的层裂强度实际上是微孔洞的形核强度。此外,Pullback 信号后的速度回跳速率反映了微损伤演化 的速率。

关键词: 平板撞击;延性金属;多尺度模拟;自由面速度曲线中图分类号: O382.3 国标学科代码: 13035 文献标志码: A

Multi-scale simulation study on characteristics of free surface velocity curve in ductile metal spallation

WANG Yuntian¹, ZENG Xiangguo¹, CHEN Huayan¹, YANG Xin², WANG Fang³, QI Zhongpeng³

(1. MOE Key Laboratory of Deep Earth Science and Engineering, College of Architecture and Environment,

Sichuan University, Chengdu 610065, Sichuan, China;

2. State Key Laboratory of Geohazard Prevention and Geoenvironment Protection,

Chengdu University of Technology, Chengdu 610059, Sichuan, China;

3. School of Materials and Energy, Southwest University, Chongqing 400715, China)

Abstract: The spallation characteristics of ductile tantalum metal under planar plate impact was analyzed through a multiscale perspective. And the typical characteristics of the free-surface velocity curve on the macro-scale were interpreted from the micro-scale to reveal the physical meanings corresponding to these typical characteristics. On the macro-scale, the spallation behaviors of the ductile tantalum metal under planar-plate impact were numerically simulated through the smooth particle hydrodynamics (SPH) and Lagrange methods, and the free-surface velocity curves of the tantalum during spallation were obtained. In addition, the free-surface velocity curves obtained by the Johnson-Cook model, Steinberg-Cochran-Guinan

 ^{*} 收稿日期: 2020-12-23; 修回日期: 2021-02-07
 基金项目: 北京应用物理与计算数学研究所计算物理重点实验室基金(Hxo2020-74)
 第一作者: 王云天(1989-),男,博士研究生,iswangyt@163.com
 通信作者: 曾祥国(1960-),男,博士,教授,博士生导师,xiangguozeng@scu.edu.cn

model and Zerilli-Armstrong model were compared in the numerical simulations. Comparison with the experimental data shows that the Steinberg-Cochran-Guinan constitutive model has a better performance in the macro-level simulation. The freesurface velocity curves at different strain rates were obtained by changing the loading conditions, and the typical characteristics of the free-surface velocity curves at different strain rates were discussed. Results show that there is an exponential relationship between spall strength and strain rate, and the spall strength obtained from the simulation has a good agreement with the experimental data. On the micro-scale, the damage evolution in the spallation region was obtained by molecular dynamics simulation conducted in the LAMMPS software, and the loading strain rate was consistent with that on the macro-scale. The micro-scale simulation reveals the physical connotation of the typical characteristics of the macro-scale free-surface velocity curve are closely related to the damage evolution in the spallation is the response of damage evolution of nucleation, growth, and aggregation of voids. From the multi-scale perspective analysis, the typical characteristics on the free-surface velocity curve are closely related to the damage evolution in the spallation area: the pullback signal is a macroscopic response of the void nucleation in the spall area; the decline amplitude of the free-surface velocity curve reflects the void nucleation condition, and the spall strength reflects the nucleation strength of the voids. What's more, the velocity rises to the first peak beyond the minima after the pullback signal reflects the rate of damage evolution. The multi-scale perspective analysis is helpful to fully understand the physical mechanism of the spallation under planar-plate impact.

Keywords: planar plate impact; ductile metal; multi-scale simulation; free surface velocity curve

延性金属在强动载荷下的动态破坏是冲击动力学中重要的基础科学问题之一,随着国防建设、汽车 工业以及航空航天等领域的发展,深入地了解延性金属在高速冲击下的动态损伤有着重要的意义^[1]。层 裂是延性金属动态损伤的一种典型表现形式,层裂实验中得到的自由面速度曲线包含了延性金属在动 态破坏过程中的丰富信息^[2-3]。在对延性金属层裂行为的研究中,平板撞击(planar plate impact, PPI)实验 是目前主要采用的一种研究方法,实验过程中内部波系传播如图 1(a)所示:飞片在 t₀时刻以一定速度撞 击样片,二者相撞时会分别传入冲击波,当冲击波到达样片自由面和飞片后表面后会形成反射稀疏波, 两束稀疏波会在样片内部相遇并产生拉伸区域,由此引起的内部损伤逐渐累积,直至材料失效断裂。 Curran 等^[3] 基于对大量实验结果的分析,指出延性金属的层裂是由于内部的微损伤形核、生长和聚集 后,形成层裂飞片的复杂动力学过程。





Fig. 1 The principle of the flat plate impact experiment and a schematic diagram of a typical free-surface velocity curve

Antoun 等^[4] 对层裂的研究历史和现状作了权威性总结,指出了层裂研究还有许多问题尚待解决。 Thomas 等^[5] 采用对称碰撞的方式研究了铁在低于冲击相变阈值下的层裂行为,并对铁在低速冲击下的 Hugoniot 弹性极限与层裂强度进行了分析;陈永涛等^[6] 采用等厚对称碰撞实验,研究了纯铁在冲击压力 超过相变阈值时的层裂行为,发现样品中出现了二次层裂现象;翟少栋等^[7] 通过轻气炮加载与激光加载 两种方式研究了铝的层裂特性,结果表明铝的层裂强度具有明显的应变率效应;Koller等^[8]通过改变冲 击波波形,对无氧铜在不同冲击波形式下的层裂特性进行了研究,结果表明冲击波波形与拉伸脉冲的持 续时间会显著影响无氧铜样片中的层裂损伤演化。实验研究在宏观尺度上提供了大量宝贵的实验数 据,但由于其自身的特点,难以直接测量延性金属内部物理量随时间的变化数据,只能通过如自由面速 度曲线等间接数据分析材料内部损伤演化过程。

随着计算机的发展与应用,数值模拟方法已经成为实验研究的有力补充。目前在冲击力学的数值 模拟研究中主要有两种方法,网格法与无网格法,其中无网格法以光滑粒子流体动力学法(smootfied particle hydrodynamics SPH)^[9]为代表得到了广泛应用。张凤国等^[10]对延性金属在三角波加载下多次层 裂破坏问题进行了数值模拟研究,对比分析了应力瞬时断裂准则和 Tuler-Butcher 准则的差异,结果表明 影响层裂片厚度的主要因素是材料自身的物理性质和加载条件;种涛等^[11]基于一维流体动力学数值模 拟方法,分析了铁层裂损伤与冲击相变之间的相互影响;Glam 等^[12]采用数值模拟方法研究了温度效应 对铝的层裂强度与Hugonoit弹性极限的影响,结果表明铝的初始温度与层裂强度正相关。Libersky等^[13] 率先在 SPH 方法中引入了材料强度效应;徐金宏等^[14]利用一种改进 SPH 方法对靶板厚度、弹丸速度和 形状对碎片云的影响进行了研究;Zhou 等^[15]在对铝球超高速撞击靶板的研究中,利用 SPH 方法成功地 进行了数值模拟分析,结果与实验数据有较好的吻合性。贺年丰等^[16]采用 SPH 方法对爆轰条件下锡的 层裂行为进行了数值模拟,结果表明 SPH 方法得到的结果与实验数据有很好的一致性;可以看出,在宏 观尺度上,数值模拟方法与实验有很好的吻合性,并且数值模拟的加载范围与条件更加灵活,计算快速、 结果直观,可以获得材料宏观尺度上的动态破坏信息,但数值模拟结果的准确定取决于采用的受状态方 程、强度模型和失效模型等因素,并且由于单元或粒子尺度影响,从微观尺度研究层裂机理的能力有限。

在微观尺度,分子动力学方法(molecular dynamics, MD)已经逐渐成为一种在微观尺度研究材料性能的主流方法。席涛等^[17] 通过分子动力学方法研究分析了超高应变率下铜的层裂特性,获得了铜在10⁹~10¹⁰ s⁻¹时的层裂强度; Rawat 等^[18]研究了应变率对单晶铁中的损伤演化的影响,结果表明随着应变率的增加,空洞更容易成核,但在低应变率条件下空洞的生长速度更快; Yang 等^[19]研究了应变率、温度、晶粒尺寸等因素对铝动态损伤发展的影响,揭示了不同影响因素下损伤发展的过程; Chen 等^[20] 通过分子动力学方法研究了晶界特性对动态损伤的影响,结果表明损伤分布与晶界取向和空洞形核应力相关。可以看出:分子动力学模拟可以揭示动态损伤的微观机理,给出材料内部应力与损伤演化信息,有助于从根本上了解金属材料的动态损伤机制,但受到计算能力的限制,无法在全尺寸上复现层裂现象^[21-23]。

典型自由面速度曲线如图 1(b)所示,从中可以分析得到延性金属材料动态损伤的宏观响应的一系 列重要信息,如加载应力幅值、拉伸应变率、层裂强度和层裂片厚度等,因此自由面速度曲线是研究层 裂演化过程的最重要参考数据之一^[24]。实际上延性金属的层裂过程十分复杂,是一种内部损伤随时空 演化的动力学过程,材料从受到拉伸应力影响开始直至完全破坏要经历一个损伤累积的过程,期间会伴 随能量的耗散和性能的退化,这都会影响材料内部波的传播过程,从而影响自由面速度曲线的形式。因 此,自由面速度曲线是微观上的损伤演化过程和宏观响应场之间相互作用的一种宏观表象,由于宏观尺 度上的实验和数值模拟很难得到反应内部损伤演化的信息,这对充分认识宏观响应与微观损伤发展之 间的关系造成了阻碍,也就导致对自由面速度曲线中的一些特征理解存在争议。裴晓阳等^[2]基于理论分 析和微观损伤演化动力学理论,对延性金属层裂自由面速度曲线的某些特征所对应的物理内涵进行了 阐述,定性地指出了宏观上自由面速度曲线的响应特征与内部损伤演化的对应关系,但是并没有从微观 尺度上的给出材料层裂过程中的损伤演化过程,缺少在微观尺度的机理分析与验证。

目前的研究大多只局限于单一尺度下层裂现象模拟或微观损伤演化分析,少有结合宏观与微观尺 度下对层裂自由面速度曲线特征的多尺度视角下的研究,缺乏对自由面速度曲线的微观视角解析。本 文以延性金属钽为研究对象,在宏观尺度上对钽在高速冲击下的层裂行为进行数值模拟,通过与实验数 据的比较,验证模型的合理性;在微观制度上通过分子动力学方法分析钽在层裂过程中的损伤演化过 程。进而将宏观尺度与微观尺度的模拟结果有机结合起来,从多尺度视角对延性金属钽的层裂行进行 研究。揭示了自由面速度曲线上的典型特征所蕴含的损伤演化规律和及物理内涵,研究结果可以为全面了解层裂这一复杂的动力学行为提供参考。

1 计算模型与方法

为了便于与实验数据进行对比验证,宏观尺度全尺寸模型参照平板撞击实验建立^[25],选取样片自由 面中心位置数据绘制自由面速度曲线,如图 2(a)所示;微观尺度分子动力学模型选取样片中心拉伸区域 进行模拟,MD 模型如图 2(b)所示。



图 2 多尺度模拟模型示意图



1.1 宏观尺度数值模拟

1.1.1 状态方程与材料本构

Mie-Grüneisen 状态方程能够较为准确地描述金属在冲击载荷下的动力学行为,其表达式如下^[16]:

$$p = \frac{\rho_0 c_0^2 \mu (1+\mu)}{\left[1 - (S_1 - 1)\mu\right]} + \gamma \rho_0 e \tag{1}$$

$$\mu = \frac{\rho}{\rho_0 - 1} \tag{2}$$

式中: ρ 为冲击后材料密度, ρ_0 为初始材料密度, S_1 为材料常数, γ 为 Grüneisen 系数,e 为质量内 能。Mie-Grüneisen 状态方程参数如表 1 所示^[26]。

Table 1	Parameters for	· Mie-Grüneise	n equation	of state
材料	$ ho_0 / ({ m kg} \cdot { m m}^{-3})$	$c_0/(m \cdot s^{-1})$	S_1	γ
Та	16690	3 3 4 0	1.20	1.67

表1 Mie-Grüneisen 状态方程参数

考虑了三种常用的描述延性金属在强动载 荷下的动态破坏行为的模型,分别是 Johnson-

Cook(JC)模型^[27]、Steinberg-Cochran-Guinan(SCG)模型^[28]以及 Zerilli-Armstrong(ZA)模型^[29]。

(1) JC 模型

JC 模型假设材料各向同性,综合考虑了应变、应变率硬化和温升软化等因素,并且将应变、应变率 硬化效应和温升软化效应解耦, JC 模型的表达式为:

т

0.88

C

0.057

$$\sigma = (A + B\varepsilon^n) \left(1 + C \ln \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0} \right) (1 - T^{*m})$$
(3)

$$T^* = \frac{T - T_r}{T_m - T_r} \tag{4}$$

B/MPa

164

表 2 Johnson-Cook 模型参数

Table 2 Parameters for the Johnson-Cook model

п

0.31

式中:A、B、C、n、m为材料常数, T_r 为参考温度, T_m 为材料融化温度, ε_0 为参考应变率。JC 模型 参数如表 2 所示^[30]。

(2) ZA 模型

基于热激活和位错动力学理论, Zerilli 等^[29]

提出了一种描述体心立方金属(BCC)的强度模型,考虑了温度、应变率与温度的影响,ZA 模型的表达式为: $\sigma = C_0 + k_1 \lambda^{-1/2} + C_2 \exp(-C_3 T + C_4 T \ln \dot{\epsilon}) + C_5 \epsilon^n$ (5)

材料

Та

A/MPa

142

式中: C_0 、 k_1 、 C_2 、 C_3 、 C_4 、 C_5 为材料常数, T为绝对温度, ε 为塑性应变, λ 为晶粒尺寸。ZA 模型参数如表 3 所示^[29]。

表 3 Zerilli-Armstrong 模型参数 Table 3 Parameters for the Zerilli-Armstrong model

					5		
材料	C ₀ /MPa	$k_1/(MPa \cdot m^{-3/2})$	C ₂ /MPa	C_3/K^{-1}	C_4/K^{-1}	C ₅ /MPa	п
Та	1 1 2 5	10	178	5.35×10 ⁻³	0.327×10 ⁻³	310	0.44

(3) SCG 模型

Steinberg 等^[28] 提出的 SCG 模型考虑了静水压力对剪切模量和屈服强度的强化效应以及温度软化效应,同时忽略了应变率效应,并假设金属在融化状态下可以忽略材料强度。屈服强度 *Y* 和剪切模量 *G* 分别为:

$$G = G_0 \left[1 + \left(\frac{G'_p}{G_0} \right) \frac{p}{\eta^{1/3}} + \left(\frac{G'_T}{G_0} \right) (T - 300) \right]$$
(6)

$$Y = Y_0 (1 + \beta \varepsilon_p)^n \frac{G}{G_0}$$
⁽⁷⁾

Y满足:

$$Y_0(1+\beta\varepsilon_p)^n \leqslant Y_{\max} \tag{8}$$

式中: Ymax 为最大屈服强度。SCG 模型参数如表 4 所示^[28]。

表 4 Steinberg-Cochran-Guinan 模型参数

Table 4 Parameters for the Steinberg-Cochran-Guinan model

材料	G_0 /GPa	Y ₀ /GPa	Y _{max} /GPa	β	n	$G_{ m p}^{\prime}$	$G'_{\mathrm{T}}/(\mathrm{MPa}\cdot\mathrm{K}^{-1})$	$T_{\rm m0}/{ m K}$
Та	69	0.77	1.10	10	0.1	1.005	-8.97	4 3 4 0

1.1.2 层裂模型

Grady^[31]基于断裂力学理论提出了层裂的能量平衡破碎模型,将层裂强度 p_s 与层裂碎片平均尺寸和应变率联系起来。对于延性金属,层裂强度随冲击加载过程而改变,表达式为^[32]:

$$p_{\rm s} = \left(2\rho c_0^2 Y \varepsilon_{\rm c}\right)^{1/2} \tag{9}$$

式中: ρ 为材料密度,Y为屈服强度, c_0 为材料体积声速, ε_c 为材料临界失效应变,对金属材料一般可取为 0.15^[31]。

1.2 自由面速度曲线分析

层裂强度是表征材料在强动载荷下性能的一个重要指标,在材料动态损伤研究中具有重要参考意义。Novikov^[33]基于声学近似的方法给出了计算层裂强度的公式:

$$\tau_{\rm spall} = \frac{1}{2} \rho_0 c_{\rm b} \Delta u_{\rm s} \tag{10}$$

式中: ρ_0 为材料初始密度, c_b 为材料初始体声速, Δu_s 为自由面速度曲线最大值与第一次速度拉回时的差值。

层裂区域平均拉伸应变率 ɛ_s的计算公式为^[34]:

$$\dot{\varepsilon}_{\rm s} = \frac{\Delta u_{\rm s}}{\Delta t_{\rm s}} \frac{1}{2c_{\rm b}} \tag{11}$$

式中: Δu_s 与 Δt_s 分别为自由面上速度最大值和第一个极小值之间的速度差和时间差。

自由面速度回跳速率,即极小值到峰值速度之间的斜率,计算公式为:

$$\dot{\varepsilon}_{\rm r} = \frac{\Delta u_{\rm r}}{\Delta t_{\rm r}} \frac{1}{2c_{\rm b}} \tag{12}$$

式中: Δu_r 与 Δt_r 分别为自由面上速度第一个极小值与其后峰值之间的速度差和时间差。 层裂片厚度 h 为:

云裂斤厚度 h 为:

$$h = \Delta t \cdot \frac{c_1}{2} \tag{13}$$

式中: Δt 为第一个层裂振荡周期持续时间, c1 为弹性纵波声速。

1.3 微观尺度 MD 模型

钽原子间的相互作用采用 Ravelo 等^[35]提出的嵌入原子势函数, MD 模拟基于 Lammps 软件^[36]进行。MD 模型尺寸为 16.53 nm×16.53 nm×16.53 nm, 共 250 000 个原子, 在模型 x、y、z 方向施加周期性边界条件。加载之前采用 NPT 系综对模型进行 30 ps 的弛豫,确保体系在施加荷载之前处于平衡状态; 加载过程采用 NVE 系综, 在 x、y、z 方向施加相等的应变率, 为了保持与宏观尺度模拟的一致性, 施加应变率数值与宏观尺度模型中的拉伸应变率相同。

2 宏观尺度模型验证

分别采用 Lagrange 网格法与 SPH 无网格法结合三种强度模型对钽的层裂进行了模拟,并对二者得到的结果进行了比较分析。表 5 中列出了用于验证的模型尺寸参数、撞击速度、强度模型等信息。模型为二维轴对称, Lagrange 网格尺寸为 0.05 mm, SPH 粒子尺寸为 0.1 mm, 样片直径为 50 mm, 撞击速度为 306 m/s。

不同模型得到的自由面速度曲线如图 3 所 示。从模拟结果与实验数据对比可以发现, Lagrange 网格法与 SPH 无网格法在数值模拟中 各有优势,在 0~2 μs 时,样片自由面速度曲线速 度由 0 m/s 增加到最大值, Lagrange 方法得到的 模拟结果与实验数据有较好的吻合性,并且 Lagrange 方法得到的结果可以观察到明显的 Hugoniot 弹性极限信号,而由 SPH 方法得到的 结果 Hugoniot 弹性极限信号不是特别明显;在自

表 5 用于验证的模型编号及参数设置

Table 5	Model number	and parameter	settings for	validation
---------	--------------	---------------	--------------	------------

模型编号	飞片厚度/mm	样片厚度/mm	强度模型	方法
V-01	3	4.95	JC	Lagrange
V-02	3	4.95	JC	SPH
V-03	3	4.95	ZA	Lagrange
V-04	3	4.95	ZA	SPH
V-05	3	4.95	SCG	Lagrange
V-06	3	4.95	SCG	SPH

S-06

4

4.95

1.34×104

由面速度开始下降后, Lagrange 方法得到的模拟结果中自由面速度回拉速率比实验数据更快, SPH 方法 得到的结果与实验数据较为吻合。结果表明采用 SPH 无网格法在钽层裂模拟中是可行的,结合两种方 法可以得到完整的自由面速度曲线数据。此外,结果表明 SCG 模型在钽的层裂模拟中更为适合。



图 3 不同模型的自由面速度曲线与实验数据^[25]对比



为了分析不同加载应变率下的层裂特性,通过改变加载条件改变了层裂区域的拉伸应变率,表6给 出了模型加载条件参数,拉伸应变率范围为 2.13×10⁴~5.40×10⁴ s⁻¹,压力范围为 6.19~12.25 GPa。不同拉 伸应变率下的钽层裂宏观尺度数值模拟结果如图4所示,从图中可以看出,自由面最大速度与飞片撞击 速度基本相同;在相同的加载速度下,通过改变飞片厚度自由面速度平台宽度也随之改变,二者之间呈 现正比关系,飞片厚度越大,自由面速度曲线平台宽度越宽。

Table 0 - 1 at anteers of planar place impact simulations and results under various serain rates							
模型编号	飞片厚度/mm	样片厚度/mm	加载速度/(m·s ⁻¹)	p/GPa	$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\mathrm{s}}/\mathrm{s}^{-1}$	$\sigma_{ m spall}/ m GPa$	$\dot{arepsilon}_{ m r}/{ m s}^{-1}$
S-01	2	4.95	306	8.84	5.40×10 ⁴	4.92	3.57×10 ⁴
S-02	2	4.95	250	7.05	4.69×10 ⁴	4.70	3.25×10 ⁴
S-03	3	4.95	410	12.25	3.92×10 ⁴	4.14	2.32×10 ⁴
S-04	3	4.95	306	8.84	3.28×10 ⁴	3.97	1.74×10 ⁴
S-05	3	4.95	210	6.19	2.68×104	3.71	1.69×10 ⁴

306

8.84

 2.31×10^{4}

3.34

表 6 不同应变率下平面撞击层裂模型参数与结果

.







3 结果分析

3.1 层裂强度

层裂强度是金属材料动态损伤行为的重要参数之一,通过对模拟结果的分析同时参照文献 [3] 给出的铜层裂强度与拉伸应变率的关系 $\sigma_{spall} = 0.15 \dot{\epsilon}^{0.2}$,我们得到了钽的层裂强度与拉伸应变率之间的关系:

 $\sigma_{\text{spall}} = 0.042\dot{\varepsilon}^{0.44} \tag{14}$

图 5 给出了钽的层裂强度与拉伸应变率的关系,从图中可以发现,层裂强度不是一个仅受到加载速度影响的物理量,在加载速度相同的条件下,S-06、S-04、S-01的层裂强度随着拉伸应变率的升高而增加,对于 S-05、S-03、S-02 尽管加载速度相差较大,但是同样表现出层裂强度与拉伸应变率之间的正比关系。这表明层裂强度呈现出一种率相关特性,即随拉伸应变率的增长而增加。

图 6 给出了对数坐标下σ_{spall}与έ_s之间的关系,从图中可以看出在对数坐标下层裂强度表现出了明显 的率相关特性。我们对比了更高拉伸应变率下的实验数据^[37],更高的拉伸应变率下层裂强度同样是随 应变率提高而增加,同时这也验证了数值模拟结果的准确性。



前文分析中的层裂强度是根据式(11)进行计算得到的,也是目前研究中广泛采用的声学近似计算 方法,但并不是唯一的计算方法。Stepanov^[33]指出,对于延性金属,平板撞击过程中冲击应以弹性纵波速 度 c₁传播。而在它前面的入射稀疏塑性波应以体积声速 c_b传播,当重点考虑弹性波的影响时,有效声 速 c_e为:

$$c_{\rm e} = 2c_{\rm l}c_{\rm b}/(c_{\rm l}+c_{\rm b}) \tag{15}$$

据此,可得到层裂强度的一种修正形式:

$$\sigma_{\text{spall}}^{(1)} = \rho_0 c_b \Delta u \left(\frac{1}{1 + c_b/c_l} \right) \tag{16}$$

式中: ρ₀为材料密度, Δu 为自由面上速度最大值和第一个极小值之间的速度差。除此之外, Kanel^[38] 指出 在层裂强度计算中还应考虑层裂片厚度影响, 当计及层裂片厚度影响时:

$$\sigma_{\rm spall}^{(2)} = \frac{1}{2} \rho_0 c_{\rm b} \Delta u + \delta_2 \tag{17}$$

$$\delta_2 = \left(\frac{h_{\rm sp}}{c_{\rm b}} - \frac{h_{\rm sp}}{c_{\rm l}}\right) \cdot \frac{|\dot{u}_1 \dot{u}_2|}{|\dot{u}_1| + \dot{u}_2} \cdot \frac{1}{2}\rho_0 c_{\rm b}$$
(18)

式中: *u*₁为样品自由面速度-时间曲线上 Pullback 信号出现前的速度变化率, *u*₂为层裂反弹信号的速度 变化率, *h*_{sp} 为层裂片厚度。由 3 种公式计算得到的层裂强度如表 7 所示, 分析发现式(17)与式(11)得

到的结果最大相差 8%,式(18)与式(17)得到 的结果相差不大。表明通过自由面速度曲线来 计算层裂强度与选用的计算方法相关,而且不同 计算模型之间存在一定差异,在分析时应该得到 关注。

3.2 自由面速度曲线特征多尺度分析

从宏观尺度下层裂特性的分析可以看出, 自由面速度曲线反映了层裂过程中材料内部损 伤演化与宏观响应场的相互作用,全面和准确地 认识自由面速度曲线对研究层裂现象具有重要

表 7	不同计算公式得到的层裂强度	

Table 7	Spall st	rengths	obtained	by	different	formu	las
---------	----------	---------	----------	----	-----------	-------	-----

模型编号	$\sigma_{ m spall}/ m GPa$	$\sigma^{(1)}_{\rm spall}/{ m GPa}$	$\sigma^{(2)}_{ m spall}/ m GPa$
S-01	4.92	5.25	5.36
S-02	4.71	5.02	5.32
S-03	4.13	4.40	4.48
S-04	3.97	4.23	4.32
S-05	3.72	3.96	4.07
S-06	3.35	3.57	3.58

的意义。基于目前的研究手段,对层裂过程中损伤演化的原位观测依然难以实现,无法直观的准确的了 解层裂过程中材料的宏观动力学响应与微结构演化之间的关系,进而导致对自由面速度曲线的理解也 存在一些争议,例如:Pullback信号的意义、损伤演化的形式、回跳速率的意义等。针对以上几个方面的 问题,通过分子动力学方法给出层裂过程中损伤演化的情况,定性的从微观尺度对自由面速度曲线上的 一些典型特征进行解读。

3.2.1 Pullback 信号

Pullback 信号是用来判断层裂是否发生的重要依据,但此时材料是否完全分离尚存争议。Zurek 等^[39] 认为 Pullback 信号出现时材料已经完全分离,但 Kanel 等^[40] 等观察到在层裂面损伤很小时,依然有 Pullback 信号出现; Bonora 等^[2] 认为 Pullback 信号的出现与微孔洞成核相关,但未给出验证。下文以 S-04 加载情况为例,对其自由面速度曲线中 Pullback 信号意义从微观尺度进行了分析。

图 7~8 给出了自由面速度下降后的时程曲线与层裂区 MD 模型内部应力及损伤演化情况, 在分析 中考虑了自由面速度曲线中 Pullback 信号在选取时的误差, 将 Pullback 信号出现时间扩展为 0.05 µs 时 间范围进行分析。从图 7 中可以看出, 在 Pullback 出现的时间范围内, 层裂区域内的应力达到峰值, 在经 过 Pullback 信号后, 层裂区域内的应力迅速下降, 出现应力松弛; 对比此时层裂区域内的损伤发展可以发 现, Pullback 信号出现的时间范围对应的是损伤发展的初始阶段, 也就是微孔洞成核阶段。在图 8 中可 以直观的观察到内部损伤演化的情况, 可以看出, 在 Pullback 信号时间内微孔洞开始逐渐产生, 此时内部 孔洞体积占比非常小, 这都表明钽在 Pullback 信号出现的时间范围内层裂区域实际上并未完全分离, 而 且 Pullback 信号对应的实际上是内部微孔洞形核的过程, 从微观尺度证明了 Bonora 等^[2]的推测。此外, 在通过自由面速度曲线计算层裂强度时, Pullback 对应的速度降低幅值(图 1b 中 Δu)是一个重要的依据, 通过前面的分析表明在钽的层裂中自由面速度曲线 Pullback 信号对应的是微孔洞形核的过程, 这表明 Δu 实际上反映了了微孔洞形核的条件, 那么通过 Δu 得到的层裂强度更准确地说应该是抵抗损伤起源的 强度或微孔洞成核的一种表征。

层裂区域的损伤演化在宏观尺度的试验下难以直接观测,借助微观尺度的 MD 模型,可以从微观尺度对钽层裂过程中的损伤演化进程进行分析。在图 9~11 中我们给出了损伤演化过程中内部孔洞所占体积分数、微孔洞数量与内部孔洞情况。从图 9 中可以看出层裂区域内微损伤的演化可以分为 3 个阶段:孔洞形核(S1)、长大(S2)与聚集(S3)。在内部压力达到峰值附近时,微孔洞开始形核,此时孔洞数量快速增加,但是孔洞体积占比非常小,在 S1 阶段空洞数量演化情况如图 10 所示;随后进入孔洞长大阶段,此时应力开始快速下降,而应力松弛意味着出现能量耗散,耗散的能量为孔洞长大提供动力,孔洞的快速增长导致孔洞占比迅速升高,孔洞数量在这个阶段开始降低,这表明在 S2 阶段中孔洞体积的增加是由于孔洞长大所致,而不是新孔洞出现造成的;在应力下降到稳定状态后,孔洞开始进入聚集阶段,此时孔洞体积占比增长速度降低,并且孔洞数量趋于稳定,这表明在损伤发展后期是层裂区域内大孔洞再聚集最终导致层裂的过程,S2 阶段的空洞长大与 S3 阶段的空洞聚集过程如图 11 所示。







图 8 Pullback 信号持续时间 Δt 内空洞演化情况 Fig. 8 Void evolution during Pullback signal duration Δt





Fig. 9 Relationship of the evolution of void volume with stress and void numbers



图 10 阶段 1 的空洞数量演化情况 Fig. 10 Void number evolution during stage 1



图 11 阶段 2 与 3 的空洞长大与聚集情况 Fig. 11 Void growing and coalescence during stage 2 and stage 3

3.2.2 回跳速率

在以往的分析中,往往只是关注 Pullback 信号及其前段自由面速度曲线,对 Pullback 信号出现后的 自由面速度回跳曲线少有涉及。以自由面速度曲线中 Pullback 信号为起点,分析了自由面速度回跳曲线 的变化情况,不同应变率条件下的自由面速度回跳曲线如图 12 所示。从图中可以看出,自由面速度回 跳曲线随加载速度和飞片厚度没有明显的变化趋势,但是随着拉伸应变率的增加,曲线逐渐变得陡峭, 斜率逐渐增加。

图 13 给出了层裂强度与回跳速率之间的关系。可以看出,层裂强度与回跳速率之间近似呈线性增长的关系,而层裂强度具有率相关特性,这表明自由面速度回跳曲线也与应变率相关。







自由面速度回跳与拉伸应变率的关系如图 14 所示。从图 14 中可以看出,自由面速度回跳速率随 着拉伸应变率的升高而增长,二者近似呈线性变化趋势。因此,可以推断钽在层裂过程中样片内部的损 伤演化速率也是随拉伸应变率的增长而增加。

从图 9 中发现 Pullback 信号后自由面速度回跳时间段内层裂区域内损伤快速增长的阶段, 微孔洞体积占比迅速增加, 这表明自由面速度回跳与损伤演化之间存在对应关系。Kanel 等^[40] 基于特征线方法分

析了回跳速率和损伤演化速率的关系,指出二者之间是正比关系。图 15 给出了层裂区域内不同应变率 下应力演化的情况,不同应变率下损伤演化的情况如图 16 所示。



图 14 不同拉伸应变率下自由面速度回跳速率











Fig. 16 Damage evolution under different strain rates

从前文的分析中,我们发现回跳速率与拉伸应变率二者近似呈线性变化趋势,拉伸应变率越高,回跳速率越大。不同应变率下应力演化情况如图 15 所示,从宏观上波系分析可知自由面速度回跳速率与应力松弛速度相关,从层裂区域中的应力变化情况可以发现,应力下降速度随应变率的升高而加快,这

表明回跳速率与应力松弛速度是呈正相关的。应力松弛速度越快,代表能量耗散的速度越快,而能量耗 散的速度与损伤演化的速度相关。图 16 给出了不同应变率下损伤演化的情况,可以明显看出随着应变 率的增加,微孔洞在长大阶段的速度越来越快。综上所述,自由面速度回跳速率是层裂区域损伤演化速 率的宏观表征。

4 结 论

本文以延性金属钽为研究对象,通过改变飞片厚度与加载速度改变加载应变率,对不同加载条件下的自由面速度曲线特性进行了分析。重要的是,结合宏观和微观尺度视角揭示了自由面速度曲线与微 损伤演化之间的联系,特别是对自由面速度曲线上的一些典型特征的物理内涵从微观尺度进行了解读, 结果表明:

(1)对钽层裂的宏观尺度模拟中, Lagrange 方法在模拟钽的弹塑性转变过程有较好的表现,能够观测到明显的 Hugoniot 弹性极限信号, SPH 方法得到的结果与实验数据更为符合,能够较为准确地描述层裂全过程中的自由面速度曲线变化情况,证明 SPH 方法研究钽的层裂行为是可行的;

(2)在宏观尺度上, 钽的层裂强度随加载应变率的升高而增加, 二者近似呈指数关系; 分析表明, 层 裂强度与回跳速率之间存在正比关系, 表明自由面速度回跳速率也是层裂行为的一种反映, 应该得到关 注; 通过观察发现了回跳速率与拉伸应变率之间近似为线性关系, 随拉伸应变率的升高而增长。

(3)微观尺度分析表明,自由面速度曲线是层裂区域内的微孔洞形核、长大、聚集直至完全断裂的 微损伤演化过程的宏观反映。Pullback 信号的临界点是微孔洞的形核在宏观上的表征,自由面速度曲线 在 Pullback 信号前的下降幅值代表了微孔洞形核的条件,而由此计算得到的层裂强度反映了微孔洞形核 强度, Pullback 信号后速度回跳速率反映了层裂区域内损伤演化的速率。

参考文献:

- [1] LU K. The future of metals [J]. Science, 2010, 328(5976): 319–320. DOI: 10.1126/science.1185866.
- [2] 裴晓阳, 彭辉, 贺红亮, 等. 延性金属层裂自由面速度曲线物理涵义解读 [J]. 物理学报, 2015, 64(3): 034601. DOI: 10.7498/ aps.64.034601.

PEI X Y, PENG H, HE H L, et al. Discussion on the physical meaning of free surface velocity curve in ductile spallation [J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(3): 034601. DOI: 10.7498/aps.64.034601.

- [3] CURRAN D R, SEAMAN L, SHOCKEY D A. Dynamic failure of solids [J]. Physics Reports, 1987, 147(5): 253–388. DOI: 10.1016/0370-1573(87)90049-4.
- [4] ANTOUN T, SEAMAN L, CURRAN D R, et al. Spall fracture [M]. New York: Springer, 2003: 199–200.
- [5] THOMAS S A, HAWKINS M C, MATTHES M K, et al. Dynamic strength properties and alpha-phase shock Hugoniot of iron and steel [J]. Journal of Applied Physics, 2018, 123(17): 175902. DOI: 10.1063/1.5019484.
- [6] 陈永涛, 唐小军, 李庆忠, 等. 纯铁材料的冲击相变与"反常"层裂 [J]. 爆炸与冲击, 2009, 29(6): 637–641. DOI: 10.11883/1001-1455(2009)06-0637-05.
 CHEN Y T, TANG X J, LI Q Z, et al. Phase transition and abnormal spallation in pure iron [J]. Explosion and Shock Waves, 2009, 29(6): 637–641. DOI: 10.11883/1001-1455(2009)06-0637-05.
- [7] 翟少栋,李英华,彭建祥,等.平面碰撞与强激光加载下金属铝的层裂行为 [J]. 爆炸与冲击, 2016, 36(6): 767–773. DOI: 10. 11883/1001-1455(2016)06-0767-07.
 ZHAISD, LIYH, PENGJX, et al. Spall behavior of pure aluminum under plate-impactand high energy laser shock loadings [J]. Explosion and Shock Waves, 2016, 36(6): 767–773. DOI: 10.11883/1001-1455(2016)06-0767-07.
- [8] KOLLER D D, HIXSON R S, III G T G, et al. Influence of shock-wave profile shape on dynamically induced damage in highpurity copper [J]. Journal of Applied Physics, 2005, 98(10): 103518. DOI: 10.1063/1.2128493.
- [9] LIU M B, LIU G R. Smoothed particle hydrodynamics (SPH): an overview and recent developments [J]. Archives of Computational Methods in Engineering, 2010, 17(1): 25–76. DOI: 10.1007/s11831-010-9040-7.

[10] 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. DOI: 10. 11883/bzycj-2016-0279.
 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. DOI: 10.11883/bzycj-2016-0279.

[11] 种涛, 唐志平, 谭福利, 等. 纯铁相变和层裂损伤的数值模拟 [J]. 高压物理学报, 2018, 32(1): 014102. DOI: 10.11858/gywlxb. 20170528.
 CHONG T, TANG Z P, TAN F L, et al. Numerical simulation of phase transition and spall of iron [J]. Chinese Journal of

High Pressure Physics, 2018, 32(1): 014102. DOI: 10.11858/gywlxb.20170528.
[12] GLAM B, STRAUSS M, ELIEZER S, et al. Shock compression and spall formation in aluminum containing helium bubbles at room temperature and near the melting temperature: Experiments and simulations [J]. International Journal of Impact Engineering, 2014, 65(3): 1–12. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2013.10.010.

- [13] LIBERSKY L D, PETSCHEK A G. Smooth particle hydrodynamics with strength of materials [C]// TREASE H E, FRITTS M F, CROWLEY W P. Advances in the Free-Lagrange Method Including Contributions on Adaptive Gridding and the Smooth Particle Hydrodynamics Method. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 1991, 248–257. DOI: 10.1007/3-540-54960-9_58.
- [14] 徐志宏, 汤文辉, 罗永. 光滑粒子模拟方法在超高速碰撞现象中的应用 [J]. 爆炸与冲击, 2006, 26(1): 53-58. DOI: 10.11883/1001-1455(2006)01-0053-06.
 XU Z H, TANG W H, LUO Y. Applications of the smoothed particle hydrodynamics method to hypervelocity impact simulations [J]. Explosion and Shock Waves, 2006, 26(1): 53-58. DOI: 10.11883/1001-1455(2006)01-0053-06.
- [15] ZHOU C E, LOU K Y, LIU G R. Three-dimensional penetration simulation using smoothed particle hydrodynamics [J]. International Journal of Computational Methods, 2007, 04(04): 671–691. DOI: 10.1142/S0219876207000972.
- [16] 贺年丰, 任国武, 陈永涛, 等. 爆轰加载下金属锡层裂破碎数值模拟 [J]. 爆炸与冲击, 2019, 39(4): 042101. DOI: 10.11883/ bzycj-2017-0354.

HE N F, REN G W, CHEN Y T, et al. Numerical simulation on spallation and fragmentation of tin under explosive loading [J]. Explosion and Shock Waves, 2019, 39(4): 042101. DOI: 10.11883/bzycj-2017-0354.

[17] 席涛, 范伟, 储根柏, 等. 超高应变率载荷下铜材料层裂特性研究 [J]. 物理学报, 2017, 66(4): 040202. DOI: 10.7498/aps.66. 040202.

XI T, FAN W, CHU G B, et al. Spall behavior of copper under ultra-high strain rate loading [J]. Acta Physica Sinica, 2017, 66(4): 040202. DOI: 10.7498/aps.66.040202.

- [18] RAWAT S, RAOLE P M. Molecular dynamics investigation of void evolution dynamics in single crystal iron at extreme strain rates [J]. Computational Materials Science, 2018, 154(11): 393–404. DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.08.010.
- [19] YANG X, ZENG X, WANG J, et al. Atomic-scale modeling of the void nucleation, growth, and coalescence in Al at high strain rates [J]. Mechanics of Materials, 2019, 135(8): 98–113. DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.05.005.
- [20] CHEN J, FENSIN S J. Associating damage nucleation and distribution with grain boundary characteristics in Ta [J]. Scripta Materialia, 2020, 187(11): 329–334. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2020.06.035.
- [21] 王云天,曾祥国,杨鑫. 高应变率下温度对单晶铁中孔洞成核与生长影响的分子动力学研究 [J]. 物理学报, 2019, 68(24):
 246102. DOI: 10.7498/aps.68.20190920.
 WANG Y T, ZENG X G, YANG X. Molecular dynamics simulation of effect of temperature on void nucleation and growth of

single crystal iron at a high strain rate [J]. Acta Physica Sinica, 2019, 68(24): 246102. DOI: 10.7498/aps.68.20190920.

- [22] HAHN E N, GERMANN T C, RAVELO R, et al. On the ultimate tensile strength of tantalum [J]. Acta Materialia, 2017, 126(3): 313–328. DOI: 10.1016/j.actamat.2016.12.033.
- [23] WANG H, GAO N, Lü G H, et al. Effects of temperature and point defects on the stability of C15 Laves phase in iron: A molecular dynamics investigation [J]. Chinese Physics B, 2018, 27(6): 066104. DOI: 10.1088/1674-1056/27/6/066104.
- [24] DANIAN C, CHUNLEI F, SHUGANG X, et al. Study on constitutive relations and spall models for oxygen-free highconductivity copper under planar shock tests [J]. Journal of Applied Physics, 2007, 101(6): 063532. DOI: 10.1063/1.2711405.
- [25] CZARNOTA C, JACQUES N, MERCIER S, et al. Modelling of dynamic ductile fracture and application to the simulation of plate impact tests on tantalum [J]. Journal of the Mechanics & Physics of Solids, 2008, 56(4): 1624–1650. DOI: 10.1016/j.jmps.2007.07.017.
- [26] MARSH S P. LASL shock Hugoniot data [M]. Berkeley: University of California Press, 1980: 75–78.

- [27] 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. DOI: 10.1016/0013-7944(85)90052-9.
- [28] 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. DOI: 10.1063/1.327799.
- [29] ZERILLI F J, ARMSTRONG R W. Dislocation-mechanics-based constitutive relations for material dynamics calculations [J]. Journal of Applied Physics, 1987, 61(5): 1816–1825. DOI: 10.1063/1.338024.
- [30] 樊雪飞. 药型罩材料性能对双模毁伤元成型影响研究 [D]. 南京: 南京理工大学, 2017: 19-22.
- [31] GRADY D E. The spall strength of condensed matter [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 1988, 36(3): 353– 384. DOI: 10.1016/0022-5096(88)90015-4.
- [32] 邸德宁,陈小伟.碎片云 SPH 方法数值模拟中的材料失效模型 [J]. 爆炸与冲击, 2018, 38(5): 948–956. DOI: 10.11883/bzycj-2017-0328.
 DI D N, CHEN X W. Material failure models in SPH simulation of debris cloud [J]. Explosion and Shock Waves, 2018, 38(5): 948–956. DOI: 10.11883/bzycj-2017-0328.
- [33] 陈大年, 俞宇颖, 尹志华, 等. 对于层裂强度传统测定方法有效性的讨论 [J]. 工程力学, 2006, 23(1): 62-68. DOI: 10.3969/j.issn.1000-4750.2006.01.013.
 CHEN D N, YU Y Y, YIN Z H, et al. On the validity of the traditional methodology of spall strength measurement [J].

CHEN D N, YU Y Y, YIN Z H, et al. On the validity of the traditional methodology of spall strength measurement [J]. Engineering Mechanics, 2006, 23(1): 62–68. DOI: 10.3969/j.issn.1000-4750.2006.01.013.

- [34] DALTON D A, BREWER J L, BERNSTEIN A C, et al. Laser-induced spallation of aluminum and Al alloys at strain rates above 2×10⁶s⁻¹ [J]. Journal of Applied Physics, 2008, 104(1): 013526. DOI: 10.1063/1.2949276.
- [35] RAVELO R, GERMANN T C, GUERRERO O, et al. Shock-induced plasticity in tantalum single crystals: Interatomic potentials and large-scale molecular-dynamics simulations [J]. Physical Review B, 2013, 88(13): 134101. DOI: 10.1103/ PhysRevB.88.134101.
- [36] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.
- [37] 张林. 延性材料冲击响应: 动态损伤与断裂、结构相变的新模型 [D]. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2005: 68-69.
- [38] KANEL G I. Dynamic strength of materials [J]. Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures, 1999, 22(11): 1011–1020. DOI: 10.1046/j.1460-2695.1999.00246.x.
- [39] ZUREK A K, THISSELL W R, JOHNSON J N, et al. Micromechanics of spall and damage in tantalum [J]. Journal of Materials Processing Technology, 1996, 60(1-4): 261–267. DOI: 10.1016/0924-0136(96)02340-0.
- [40] KANEL G I, RAZORENOV S V, BOGATCH A, et al. Simulation of spall fracture of aluminum and magnesium over a wide range of load duration and temperature [J]. International Journal of Impact Engineering, 1997, 20(6): 467–478. DOI: 10.1016/S0734-743X(97)87435-0.

(责任编辑 王易难)