文章编号:1000-5773(2007)04-0373-06

爆炸压实过程中颗粒碰撞问题的 SPH 法数值模拟*

赵 铮,李晓杰,闫鸿浩,欧阳欣

(大连理工大学工程力学系工业装备结构分析国家重点实验室,辽宁大连 116024)

摘要:目前采用 SPH 无网格方法对大变形问题进行数值模拟已成为计算机仿真技术的研究热点。利用 LS-DYNA 程序中的 SPH 法对粉末爆炸压实过程中颗粒的碰撞问题进行了数值模拟。在二维及三维模型下,模拟出了微射流的产生及孔隙塌缩闭合过程,验证了粉末压实理论。另外还利用三项式状态方程及 Rankine-Hugoniot 关系推导得出了 LS-DYNA 中采用的高压下固体材料的 Grüneisen 状态方程。

关键词:数值模拟;SPH;Grüneisen 状态方程;LS-DYNA;爆炸压实

中图分类号:O389 **文献标识码**:A

1 引 言

粉末材料的爆炸压实是利用炸药爆炸的冲击波把金属或非金属粉末压实烧结成型的加工工艺,也称爆炸烧结。爆炸压实可以在 10 μs 左右时间内完成 1～50 GPa 高压和 2 000 ℃左右高温的加载卸载[1],将材料压实到粉末物质的理论密度,得到优质、致密的块体材料。压实过程中晶粒来不及长大,能够保持粉末材料的原有特性。爆炸压实技术的瞬时、高温、高压特性是其他一切常规工艺方法无法比拟的,是制取新材料的一种重要方法,国内外已有很多学者对此展开了广泛研究,采用爆炸压实制备了 Cu-Cr[2]、TiAl-TiB_2[3]、$R_2Fe_{14}B$-Fe[4]、YBCO[5]等材料。众多学者对爆炸压实理论进行了深入研究[6-14]。

由于爆炸压实过程只有几微秒,同时伴随着高温高压,所以无法对压实过程进行观测。采用计算机进行数值模拟,可以很好地观察到压实过程中金属颗粒的碰撞、变形,甚至可以清晰地再现微射流的产生。SPH(Smooth Particle Hydrodynamic)法称为光滑质点流体动力学方法,是由 J. J. Monaghan 于 1988 年提出的。SPH 法属于无网格法的一种,其形函数是建立在一系列离散点上,不需要借助网格,克服了有限元法对网格的依赖性,避免了因网格畸变而引起的计算困难,适用于处理高速碰撞、动态断裂、塑性流动、流固耦合等问题[15]。SPH 法的离散化不使用单元,而是使用固定质量的可动点,即质点。质量固定在质点的坐标系上,所以 SPH 基本上也是拉格朗日型,所需的基本方程也是守恒方程和固体材料本构方程。SPH 法中的密度、压力、温度等宏观变量可由积分插值计算得到,各质点相互作用借助于插值函数来描述。

本研究采用 LS-DYNA 程序中的 SPH 法对铜粉的爆炸压实过程中颗粒的碰撞问题进行数值模拟,验证粉末压实理论中的微射流机理。

2 本构方程与状态方程

粉末爆炸压实过程中金属颗粒的速度可达几百米每秒甚至数千米每秒。所以需要采用考虑应变率

* **收稿日期**:2006-12-19;**修回日期**:2007-03-15

基金项目:国家自然科学基金(10172025)

作者简介:赵 铮(1979－),男,博士研究生,主要从事爆炸力学数值模拟研究. E-mail:zhaozheng@china.com.cn

通讯作者:李晓杰(1963－),男,教授,博士生导师,主要从事爆炸力学研究. E-mail:dalian03@tom.com

效应和温度效应的本构方程，本研究采用 Johnson-Cook 本构方程

$$\sigma_y=(A+B\varepsilon^{p^n})(1+c\ln\dot{\varepsilon}^*)(1-T^{*^m}) \tag{1}$$

式中：ε^p 为等效塑性应变；$\dot{\varepsilon}=\dot{\varepsilon}^p/\dot{\varepsilon}_0$ 为等效塑性应变率，其中 $\dot{\varepsilon}_0=1/s$；$T^*=(T-T_{room})/(T_{melt}-T_{room})$ 为同系温度。

高温高压、高速变形及流体材料需要使用状态方程来描述体积变化，本研究采用 Grüneisen 状态方程

$$p=\frac{\rho_0C^2\mu[1+(1-\gamma_0/2)\mu-a\mu^2/2]}{\left[1-(S_1-1)\mu-S_2\dfrac{\mu^2}{\mu+1}-S_3\dfrac{\mu^3}{(\mu+1)^2}\right]^2}+(\gamma_0+a\mu)E_v \tag{2}$$

在利用 LS-DYNA 有限元程序进行数值模拟时，上述形式的 Grüneisen 状态方程被广泛应用，但其具体的推导过程未见文献报道。本研究结合三项式状态方程及 Rankine-Hugoniot 关系得出了这种 Grüneisen 状态方程的具体推导过程。

数兆巴以下固体材料状态方程一般可以表示为

$$p(v,T)=p_x(v)+p_{TN}(v,T)+p_{Te}(v,T) \tag{3}$$

$$E(v,T)=E_x(v)+E_{TN}(v,T)+E_{Te}(v,T) \tag{4}$$

上式称为三项式状态方程，等号右端第一项为“冷”贡献，第二项为晶格热贡献，第三项为自由电子热贡献。当温度不高时，即使对于金属材料，在三项式状态方程中可以不考虑自由电子的热贡献。这时，可以把状态方程表示成如下的一般形式[16]

$$p(v,T)=p_x(v)+p_T(v,T) \tag{5}$$

$$E(v,T)=E_x(v)+E_T(v,T) \tag{6}$$

将上面两式代入热力学恒等式

$$\left(\frac{\partial E}{\partial v}\right)_T=T\left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v-p \tag{7}$$

得到

$$p_T(v,T)=T\left(\frac{\partial p_T}{\partial T}\right)_v \tag{8}$$

积分上式可得

$$p_T(v,T)=\frac{\gamma}{v}E_T(v,T) \tag{9}$$

或者可以写成

$$p-p_x=\frac{\gamma}{v}(E-E_x) \tag{10}$$

(10)式称为 Grüneisen 状态方程，其中 γ 是积分过程中引进的一个积分常数，称为 Grüneisen 系数，是比容 v 的函数，常常可以写成如下形式

$$\gamma=a+(\gamma_0-a)\frac{v}{v_0} \tag{11}$$

γ_0 为常温常压下材料的 Grüneisen 系数，a 为 γ 的一阶修正系数[17]。

(10)式是材料在某一状态下的压力、能量与冷压、冷能的关系。其中冷压 p_x 和冷能 E_x 与温度无关，只是比容 v 的函数，需要求解晶体系统的 Schrödinger 方程才能精确确定，但晶体 Schrödinger 方程目前还无法严格求解，只能选择一定的简化物理模型进行数值计算，例如能带理论、Thomas-Fermi 原子统计理论等[16]。由这些方法求得的 p_x 和 E_x 表达式比较复杂，为了方便应用需要采用其他简单形式表示。

在冲击状态下，波阵面上材料的压强 p_H 和能量 E_H 也应该满足(10)式，即有

$$p_H-p_x=\frac{\gamma}{v}(E_H-E_x) \tag{12}$$

将(10)式和(12)式相减,得到

$$p-p_{\mathrm{H}}=\frac{\gamma}{v}(E-E_{\mathrm{H}}) \tag{13}$$

p_{H} 和 E_{H} 可由 Rankine-Hugoniot 关系式求得。

正冲击波在介质中传播(如图 1),根据波阵面的质量守恒、动量守恒和能量守恒定律可以得到如下的 Rankine-Hugoniot 关系式

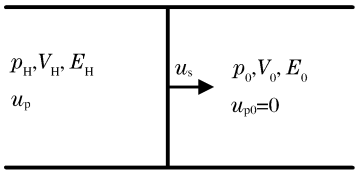


图 1　正冲击波的传播

Fig. 1　Normal shock wave propagation

$$v_{\mathrm{H}}/v_0=(u_{\mathrm{s}}-u_{\mathrm{p}})/u_{\mathrm{s}} \tag{14}$$

$$p_{\mathrm{H}}-p_0=\rho_0 u_{\mathrm{s}}u_{\mathrm{p}} \tag{15}$$

$$E_{\mathrm{H}}-E_0=\frac{1}{2}(p_{\mathrm{H}}+p_0)(v_0-v_{\mathrm{H}}) \tag{16}$$

下标“0”表示冲击波阵面到达前材料的初始状态;下标“H”表示冲击波阵面到达后材料的状态。u_{s} 为冲击波阵面速度;u_{p} 为波阵面通过后材料的质点速度。

初始状态的 p_0 和 E_0 远小于 p_{H} 和 E,所以可以近似为 $p_0=0$,$E_0=0$。则公式(16)简化为

$$E_{\mathrm{H}}=\frac{1}{2}p_{\mathrm{H}}(v_0-v_{\mathrm{H}}) \tag{17}$$

令 $v_{\mathrm{H}}=v$,即利用 p_{H}-v_{H} 关系等容推广得到 p-v 关系。

将(17)式代入(13)式可以得到

$$p=\left[1-\frac{\gamma(v_0-v)}{2v}\right]p_{\mathrm{H}}+\frac{\gamma}{v}E \tag{18}$$

另外 u_{s}、u_{p} 关系可以表示为[18]

$$u_{\mathrm{s}}=C+S_1u_{\mathrm{p}}+S_2\frac{u_{\mathrm{p}}^2}{u_{\mathrm{s}}}+S_3\frac{u_{\mathrm{p}}^3}{u_{\mathrm{s}}^2} \tag{19}$$

联立公式(14)式、(15)式、(19)式可以得到

$$p_{\mathrm{H}}=\frac{\rho_0C^2\mu(\mu+1)}{\left[1-(S_1-1)\mu-S_2\dfrac{\mu^2}{\mu+1}-S_3\dfrac{\mu^3}{(\mu+1)^2}\right]^2} \tag{20}$$

其中

$$\mu=(v_0-v)/v$$

将(20)式和(11)式代入(18)式,最终得到 LS-DYNA 中采用的(2)式形式的 Grüneisen 状态方程

$$p=\frac{\rho_0C^2\mu[1+(1-\gamma_0/2)\mu-a\mu^2/2]}{\left[1-(S_1-1)\mu-S_2\dfrac{\mu^2}{\mu+1}-S_3\dfrac{\mu^3}{(\mu+1)^2}\right]^2}+(\gamma_0+a\mu)E_v \tag{2}$$

其中 $E_v=E/v_0=C_VT/v_0$。

3　SPH 法数值模拟

铜粉的 Grüneisen 状态方程参数由文献[19]得到

$$C=3\,940\ \mathrm{m/s},S_1=1.489,S_2=S_3=0,\gamma_0=2.02,a=0.47,E_v=0$$

由铜粉的冲击加载 Hugoniot 曲线[20]可知,初始密度为 4.5 g/cm^3 的铜粉,在爆轰压力 4 GPa 时可以完全压实。由(12)式、(13)式可以计算出在 4 GPa 压力下,波阵面后铜粉颗粒的速度为 600 m/s。

采用 LS-DYNA 有限元程序建立二维和三维模型进行数值模拟,铜颗粒直径均为 80 μm。二维模型两颗粒相对速度 600 m/s。图 2 为二维模型碰撞过程中的等效应力云图,在 $t=0.057$ μs 时产生微小射流,随时间的增长,射流逐渐延长。这与 Meyers[21]的理论分析及实验观测结果相符。三维模型顶端两颗粒水平相对速度为 600 m/s,向下的垂直速度为 300 m/s,底部颗粒初速度为 0。图 3 为三维模型三颗粒碰撞应力云图,从中可见在每个接触点都产生了一个应力波,同一颗粒中的两个应力波在传播过程中发生干涉。碰撞过程中颗粒的接触界面处产生微小射流,填充了一部分孔隙(如图 4)。随着孔隙

的逐渐闭合，微射流会在前方的颗粒表面产生侵彻。将三个球形颗粒之间的孔隙近似成圆锥体，在 LS-DYNA 后处理过程中可以求出每一时刻的孔隙圆锥体积，孔隙空间的变化率称为孔隙闭合率。孔隙闭合率随时间变化关系如图 5，在 $t=0.038$ μs 时，孔隙完全必合。图 6 为颗粒接触界面处的等效塑性应变曲线，在碰撞过程中塑性应变逐渐增加，颗粒动能转化为塑性应变能，会使颗粒接触表面温度迅速升高。

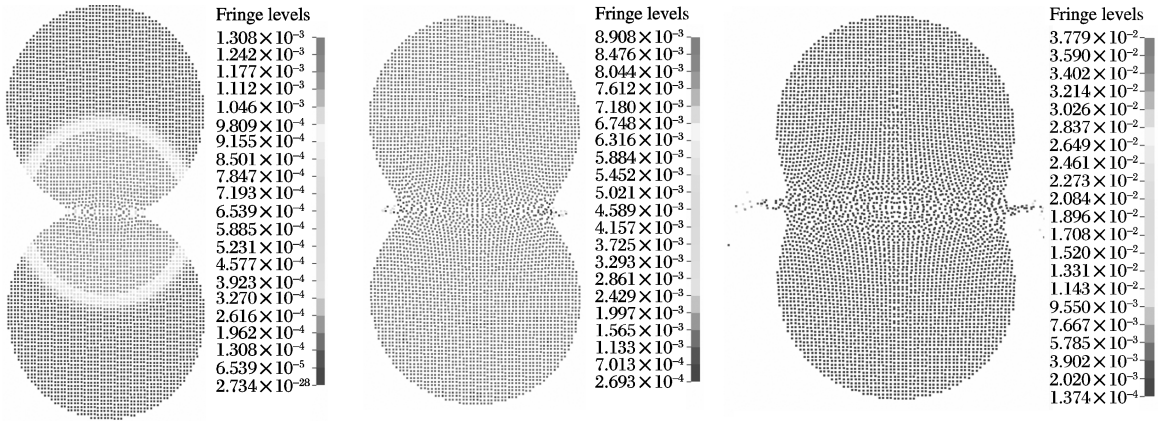


图 2 二维射流

Fig. 2 2D jet flow

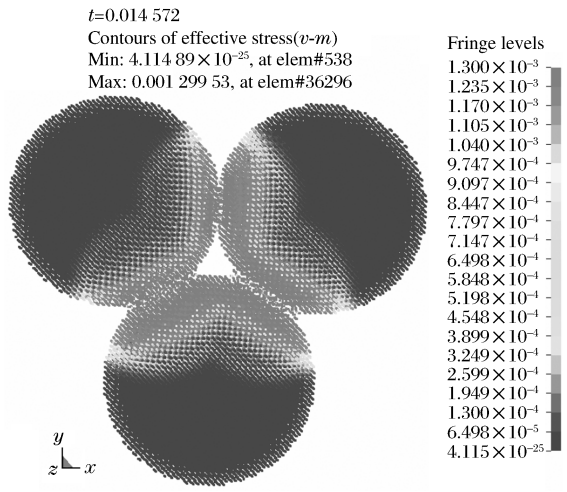


图 3 三维碰撞等效应力

Fig. 3 Von mises stress of 3D impact

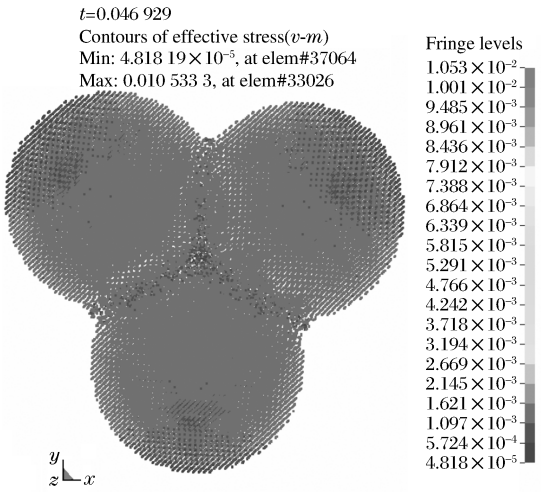


图 4 三维碰撞微射流

Fig. 4 Micro-jet flow of 3D impact

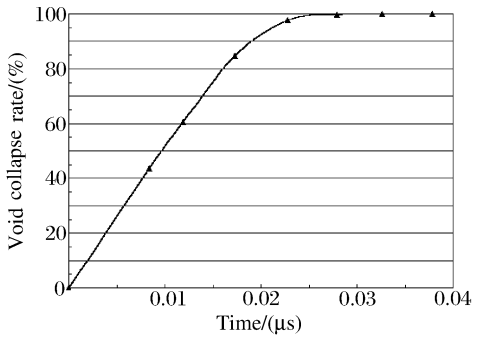


图 5 孔隙塌缩率曲线

Fig. 5 Curve of void collapse rate

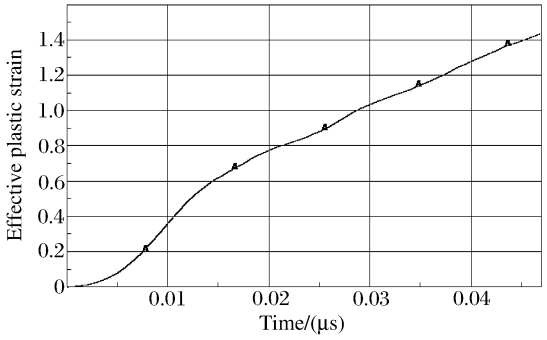


图 6 颗粒接触界面等效塑性应变曲线

Fig. 6 Curve of effective plastic strain at contact interface

4 结　论

本研究利用 LS-DYNA 程序、采用 SPH 方法对铜粉爆炸压实过程中的颗粒碰撞现象进行了数值模拟。再现了颗粒碰撞过程中微射流的产生以及孔隙塌缩现象,表明 SPH 无网格法非常适合模拟大变形问题。得到了孔隙塌缩率随时间变化的关系曲线,为推导多孔材料的状态方程提供了依据。另外利用三项式物态方程及 Rankine-Hugoniot 关系推导得出 LS-DYNA 中采用的高压下固体材料的 Grüneisen 状态方程,为利用 LS-DYNA 有限元程序进行数值模拟提供了理论依据。

References:

[1] Gao J X, Xu X H, Qin J W, et al. Advanced Sintering Technique of Nanometer Magnetic Powder-Explosive Consolidation [J]. Metallic Fuctional Materials, 1995, 4(5): 199-201. (in Chinese)
高举贤,徐小鸿,秦建武,等. 纳米磁性粉末成形新工艺-爆炸烧结 [J]. 金属功能材料,1995,4(5):199-201.

[2] Li J P, Luo S J. Characteristics of CuCr Contact Materials Made by Explosive Sintering [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2001, 11(1): 98-101. (in Chinese)
李金平,罗守靖. 爆炸烧结 CuCr 触头材料的性能 [J]. 中国有色金属学报,2001,11(1):98-101.

[3] Zhou X G, Yi D Q, Tang R Z. The Intial Study of Manufacturing TiAl/TiB_2 Composite by Explosive Compaction [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 1993, 22(1): 31-36. (in Chinese)
周新贵,易丹青,唐仁正. 用爆炸压实方法制取 TiAl/TiB_2 复合材料除探 [J]. 稀有金属材料与工程,1993,22(1):31-36.

[4] Chen K H, Jin Z Q. Bulk Nanocomposite Magnets Produced by Dynamic Shock Compaction [J]. J Appl Phys, 2004, 96(2): 1276-1278.

[5] Mamalis A G. Manufacturing of Bulk High-T_c Superconductors [J]. International Journal of Inorganic Materials, 2000, 2: 623-633.

[6] Zhang D L. Numerical Simulation of Powder Materials by Explosive Compaction [J]. Advances in Mechanics, 1994, 24(1): 37-56. (in Chinese)
张德良. 粉末材料爆炸压实数值模拟 [J]. 力学进展,1994,24(1):37-56.

[7] Shao B H, Gao J X, Li G H. The Mechanism of Energy Deposition at the Interface of Metal Powder in Explosive Consolidation [J]. Explosive and Shock Waves, 1989, 3(1): 17-27. (in Chinese)
邵丙璜,高举贤,李国豪. 金属粉末爆炸烧结界面能量沉积机制 [J]. 爆炸与冲击,1989,3(1):17-27.

[8] Wang L, Tang R F, Wang T F. Analysis of Heat Deposition in Explosive Sinter Wu-Cu Alloy Powder [J]. Journal of Ballistics, 1995, 7(1): 82-88. (in Chinese)
王　雷,汤瑞峰,王铁福. 爆炸烧结钨铜合金粉的热沉积现象分析 [J]. 弹道学报,1995,7(1):82-88.

[9] Wang J X, Li X J, Yan H H. Research of Energy Deposition Caused by Micro-Explosive Welding in Explosive Consolidation of Metal Powders [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2006, 35(7): 1039-1044.

[10] Zheng J, Wang Z P. Evolution of Voids in Ductile Porous Materials at High Strain Rate [J]. Acta Mechanica Solida Sinica, 1994, 15(3): 189-198. (in Chinese)
郑　坚,王泽平. 高应变率下延性多孔介质中孔洞的动态演化 [J]. 固体力学学报,1994,15(3):189-198.

[11] Herrmann W. Constitutive Equation for the Dynamic Compaction of Ductile Porous Material [J]. J Appl Phys, 1969, 40(6): 2490-2499.

[12] Carroll M M, Holt A C. Static and Dynamic Poro-Collapse Relations for Ductile Porous Materials [J]. J Appl Phys, 1972, 43(4): 1626-1635.

[13] Butcher B M. Shock-Wave Compaction of Porous Aluminum [J]. J Appl Phys, 1974, 45(3): 3864-3875.

[14] Naumann R J. Equation of State for Porous Metals under Strong Shock Compression [J]. J Appl Phys, 1971, 42(12): 1945-4953.

[15] Li Y C, Shi D Y, Zhao Y. Basic Theory and Engineering Practice of Ansys LS-DYNA [M]. Beijing: China Water Power Press, 2006: 389-394. (in Chinese)

李裕春,时党勇,赵 远. ANSYS LS-DYNA 基础理论与工程实践 [M]. 北京:中国水利水电出版社,2006:389-394.

[16] Jing F Q. Experiment Equation of State (2nd ed) [M]. Beijing: Science Press, 1999:17-46. (in Chinese)
经福谦. 实验物态方程导引(第 2 版) [M]. 北京:科学出版社,1999:17-46.

[17] Tang W H, Zhang R Q. Theory and Calculating of Euqation of State [M]. Changsha: Press of National University of Defense Technology, 1999:113-122. (in Chinese)
汤文辉,张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 长沙:国防科技大学出版社,1999:113-122.

[18] Nellis W J, Radousky H B, Hamilton D C. Equation-of-State, Shock-Remperature, and Electrical-Conductivity Data of Dense Fluid Nitrogen in the Region of the Dissociative Phase Transition [J]. J Chem Phys, 1991, 94(3): 2244-2257.

[19] Cooper S R, Benson D J, Nesterenko V F. A Numerical Exploration of the Role of Void Geometry on Void Collapse and Hot Spot Formation in Ductile Materials [J]. International Journal of Plasticity, 2000, 16: 525-540.

[20] Marsh S P. LASL Shock Hugoniot Data [M]. Berkeley: University of California Press, 1980.

[21] Meyers M A, Benson D J, Olevsky E A. Shock Consolidation: Microstructurally-Based Analysis and Computational Modeling [J]. Acta Mater, 1999, 47(7): 2089-2108.

Numerical Simulation of Particles Impact in Explosive-Driven Compaction Process Using SPH Method

ZHAO Zheng, LI Xiao-Jie, YAN Hong-Hao, Ouyang-Xin

(*The State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian* 116024, *China*)

Abstract: Numerical simulation of large deformation using SPH meshless method has recently become a research hotspot. In this work, we used SPH of LS-DYNA to simulate particles impact in explosive-driven compaction process. Micro-jet flow and void collapse phenomena were mapped, supporting the theory of explosive-driven compaction. Additionally, Grüneisen equation of state used in LS-DYNA code was obtained by the three-term equation of state and Rankine-Hugoniot relation.

Key words: numerical simulation; SPH; Grüneisen equation of state; LS-DYNA; explosive-driven compaction