第21卷 第2期
2007年6月

高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 21, No. 2
June, 2007

文章编号:1000-5773(2007)02-0113-08

钽的层裂实验数值模拟*

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:采用连续介质力学基唯象模型模拟分析了钽的平板撞击层裂行为。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-Kutta 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。将数值模拟结果和相关实验数据进行了对比分析,结果表明,对于样品中的拉应力峰值明显高于材料层裂强度的实验(中、高速平板撞击实验),理论模型具有较好的预估能力,但对于临界层裂问题(低速平板撞击实验),该模型对材料损伤与失效过程的描述可能不够准确,需要进一步改进。

关键词:钽;层裂;率相关塑性;孔洞;对角隐式 Runge-Kutta 法;热粘塑性本构关系;临界层裂

中图分类号:O346.5 **文献标识码**:A

1 引 言

钽是一种过渡金属,由于其具有高密度、高熔点、高冲击阻抗、耐腐蚀、可焊接等特点,特别是在很宽温度范围内有良好的延展性、热传导和断裂韧性,在电子器件、超合金、医疗器械、高温构件、化工设备以及穿甲弹等领域有广泛的应用[1]。作为一种典型的体心立方(bcc)结构金属,钽的力学性能——尤其是高应变率条件下的动态力学行为——不仅容易受微量杂质、结晶结构等细观组织的影响,而且对温度和应变率的变化相当敏感,引起了国内外学者的关注。Zerilli 和 Armstrong[2]采用他们提出的 Z-A 模型,研究了温度、应变率、加工硬化和晶粒尺寸等因素对钽的塑性行为的影响。Meyers[3]、Chen[4]和 Gourdin[5]等人研究了钽在高应变率条件下的塑性行为和本构关系。Duprey 和 Clifton[6-7]则研究了钽在压-剪复合加载下的动态力学行为。这些研究工作显示,钽的本构行为呈现出比较明显的递减硬化特点。Thissell[8]以及 Tonks[9]等研究了钽在冲击条件下的层裂问题,他们的研究结果表明,材料的纯度水平明显影响层裂。值得注意的是 Zurek 和 Tonks 等人[10-11]近期的研究工作,他们着重研究了纯钽的"早期层裂"(Incipient Spall)过程。采用 EBSD(Electron Backscatter Diffraction)技术,他们仔细观察了微孔洞之间区域的"应变局部化"(Strain Localization)现象,并且把它作为一种损伤形式,命名为"Linkage"。他们认为,微孔洞在相对更大的距离通过基体的局域化应变路径而相互作用。在较长脉冲载荷作用下,微孔洞之间区域的"应变局部化"有足够时间发展成为"Linkage"。在此基础上,他们建立了微力学机理模型,对钽的"早期层裂"过程进行了数值模拟,获得了和实验数据比较吻合的数值模拟结果。

本研究采用连续介质力学基唯象模型,对钽的层裂实验进行数值模拟,通过将数值模拟结果和相关实验数据进行对比分析,检验模型的合理性和适应性。

2 理论模型

2.1 基本假设与损伤定义

采用如下假设:

* **收稿日期**:2006-05-29;**修回日期**:2006-06-29

作者简介:江松青(1969—),男,博士,副研究员,主要从事材料本构关系、动态损伤与断裂研究. E-mail:jsqing@iapcm.ac.cn

(1) 材料是基体和微孔洞的组合体,组合体是均匀、各向同性的,可看作是连续介质;

(2) 基体材料塑性不可压;

(3) 引入孔隙度 f、拉伸损伤 D_t、剪切损伤 D_s 等概念,其中,① 拉伸损伤由孔隙度决定,它们之间的区别是: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。② 剪切损伤与材料的偏塑性变形有关,和拉伸损伤一样,它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

$$\frac{K}{K_m}=1-\frac{f}{1-\alpha(1-f)}\qquad\left(\alpha=\frac{1}{1+4G_m/K_m}\right) \tag{1}$$

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

$$p=\frac{K}{K_m}p_m \tag{2}$$

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

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

式中密实固体材料的压缩比为

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

比内能的演化方程为

$$\dot{I}=(-p\dot{\varepsilon}_v+s_{ij}\dot{e}_{ij})/(1+\mu) \tag{5}$$

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

$$\varphi=[2+(1-f)^2]J_2+3[1-(1-f)^2]p^2-\delta(f)\sigma_m^2=0 \tag{6}$$

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 $(1-f)\sigma_m\dot{\varepsilon}_m^p=\sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}^p$,则含微孔洞损伤材料的粘塑性应变率可表示为

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p=\frac{(1-f)\sigma_m\dot{\varepsilon}_m^p}{\dfrac{\partial\varphi}{\partial\sigma_{re}}\sigma_{re}}\frac{\partial\varphi}{\partial\sigma_{ij}}=\frac{(1-f)\dot{\varepsilon}_m^p}{2\delta(f)\sigma_m}\left\{[2+(1-f)^2]s_{ij}+2[1-(1-f)^2]p\delta_{ij}\right\} \tag{7}$$

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

$$\dot{\varepsilon}_m^p=\frac{2}{\sqrt{3}}\dot{\varepsilon}_0^p\exp\left[-\left(\frac{n+1}{2n}\right)\left(\frac{z}{\sigma_m}\right)^{2n}\right] \tag{8a}$$

$$\dot{z}=m(z_1-z_0)\dot{w}_p \tag{8b}$$

$$\dot{w}_p=\sigma_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}^p \tag{8c}$$

$$m=m_0+m_1\exp(-\alpha w_p) \tag{8d}$$

$$n=A+B/T \tag{8e}$$

$$T=T_0+\frac{I}{\rho_0 c_V} \tag{8f}$$

或者采用修正的 J-C 模型

$$\sigma_m = [A + B(\varepsilon_m^p)^n](\dot{\varepsilon}_m^p/\dot{\varepsilon}_0)^C(1 - T^{*M}) \tag{9a}$$

$$T^* = \frac{T - T_0}{T_m - T_0} \tag{9b}$$

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

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

考虑到孔洞的形核效应,孔隙度的增长率方程为

$$\dot{f} = \dot{f}_n + \dot{f}_g \tag{11a}$$

$$\dot{f}_n = F_\sigma(\dot{\sigma}_m + \dot{p}) + F_\varepsilon \dot{\varepsilon}_m^p \tag{11b}$$

$$\dot{f}_g = (1 - f)\dot{\varepsilon}_v^p \tag{11c}$$

式中:

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

$$F_\varepsilon = \left(f_2/s_2\sqrt{2\pi}\right)\exp\left\{-[(\varepsilon_m^p - \varepsilon_N)/s_2]^2/2\right\}$$

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

$$\dot{D}_s = \begin{cases} 0 & (\varepsilon_p < \varepsilon_d) \\ (D_{sc}\dot{\varepsilon}_p)/(\varepsilon_f - \varepsilon_d) & (\varepsilon_p \geqslant \varepsilon_d) \end{cases} \tag{12}$$

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

$$\varepsilon_f = [D_1 + D_2\exp(D_3\sigma^*)](1 + D_4\ln(\dot{\varepsilon}_p/\dot{\varepsilon}_0)(1 + D_5 T^*) \tag{13}$$

2.4.3 断裂判据

采用混合型断裂判据,则有

$$(D_t/D_{tc})^2 + (D_s/D_{sc})^2 \geqslant 1 \tag{14}$$

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,本研究采用一种对角隐式 Runge-Kutta 方法对上述本构模型进行求解,提高了热粘塑性本构关系计算的稳定性和精度。

3 钽的层裂实验模拟分析

下面采用上述理论模型,对文献[12]中钽的层裂实验(相关实验参数如表 1 所示)进行数值模拟,通过将数值模拟结果和实验数据进行对比分析,对理论模型进行适应性考察。

表 1　实验参数

Table 1　Parameters for the experiments

Number	Impact stress/(GPa)	Flyer velocity/(m/s)	Flyer thickness/(cm)	Target thickness/(cm)
1	22.6	705	0.1452	0.4057
2	16.1	522	0.1631	0.4066
3	11.5	380	0.1442	0.4051
4	8.9	294	0.1451	0.3994

3.1 模型参数

根据张林[12]等人的实验数据以及刘海风[13]等人的理论结果，钽的低压冲击 Hugoniot 关系拟合为：$D=c_0+\lambda u$，其中，$c_0=3.34$ km/s，$\lambda=1.395$。于是，利用台劳展开，并考虑到压缩比远小于 1，忽略高阶小量，则钽的 Mie-Grüneisen 状态方程参数 β_1、β_2、β_3 分别取为(具体数据见表 2)

$$\begin{cases}\beta_1 = \rho_0 c_0^2 \\ \beta_2 = (2\lambda-1)\rho_0 c_0^2 \\ \beta_3 = (\lambda-1)(3\lambda-1)\rho_0 c_0^2\end{cases}$$

基体材料 BP 本构模型的参数以及拉伸损伤参数主要采用 Rajendran[14]等人的数据，只是考虑到钽的纯度不同，对参数 z_0、z_1 和 σ_N 等稍加修改(见表 3 和表 5)。改进的 J-C 模型采用张林[12]的数据(见表 4)。而剪切参数则参考 HR2 钢的参数，见表 6。需要指出的是，对于层裂问题，损伤以拉伸损伤为主，剪切损伤的影响可以忽略。

表 2 钽的状态方程参数

Table 2 Parameters for EOS of tantalum

ρ_0 /(g/cm^3)	c_V /(J·g^{-1}·K^{-1})	K_m /(GPa)	G_m /(GPa)	β_1 /(GPa)	β_2 /(GPa)	β_3 /(GPa)	γ
16.67	0.14	196	69	186.0	332.9	234.0	1.58

表 3 钽的 B-P 模型参数

Table 3 Parameters for B-P model of tantalum

$\dot{\varepsilon}_0^p$ /(s^{-1})	A	B	α /(GPa^{-1})	m_0 /(GPa^{-1})	m_1 /(GPa^{-1})	z_0 /(GPa)	z_1 /(GPa)
1.0×10^8	0.74	0.0	0.0	2.0×10^3	0.0	1.9	3.7

表 4 钽的改进 J-C 模型参数[12]

Table 4 Parameters for modified J-C model of tantalum[12]

$\dot{\varepsilon}_0^p$ /(s^{-1})	A /(GPa)	B /(GPa)	C	M	n	T_m /(K)	T_0 /(K)
4.0×10^{-4}	0.34	0.26	0.042	0.88	0.32	3 269	300

表 5 钽的拉伸损伤参数

Table 5 Parameters for tensile damage of tantalum

f_0	f_1	s_1 /(GPa)	σ_N /(GPa)	f_{cr}	D_{tc}
1.0×10^{-3}	0.003	1.218	4.87	1.0	0.3

表 6 钽的剪切损伤参数

Table 6 Parameters for shear damage of tantalum

ε_d	D_1	D_2	D_3	D_4	D_5	D_{sc}
0.000	−0.800	2.100	−0.500	0.002	0.610	0.3

3.2　计算结果及分析

图 1 给出了上述四种冲击速度下自由面速度曲线的数值模拟结果与实验数据的比较。其中，黑点是实验结果，实线是基体材料采用改进的 J-C 模型的计算结果，点划线是基体材料采用 B-P 模型的计算结果。

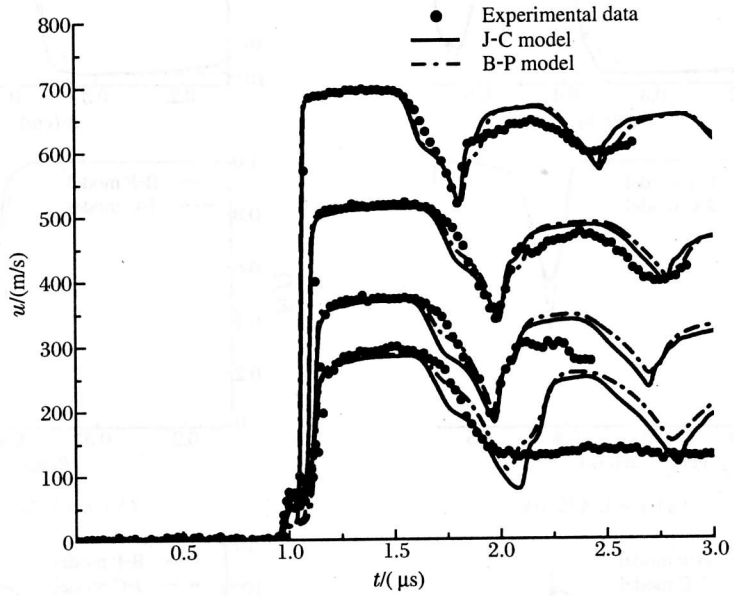


图 1　自由面速度波形的计算结果与实测数据比较

Fig. 1　Comparison of free surface velocity profile between simulations and experimental data

从图 1 中可以看出：

(1) 从理论与实验结果的对比来看，对中、高速情况而言，理论和实验符合得比较好，例如，① 从“回拉”(Pull-Back)信号来看，上升前沿、“回拉区”(Pull-Back Region)宽度等方面，两者都比较吻合，这说明理论模型对损伤发展过程的描述可能比较符合实际情况；② 从层裂信号来看，振荡周期和强度等方面，两者也比较吻合，这说明靶板样品中发生层裂的位置可能和实验结果差不多。但从低速情况看，理论模型的结果和实验数据相差较大。因此，对于样品中的拉应力峰值明显高于材料层裂强度的实验，上述理论模型具有较好的预估能力，但对于临界层裂问题，该模型对材料损伤与失效过程的描述可能不够准确，需要进一步改进。

(2) 从基体材料本构模型的对比来看，对于 Hugoniot 弹性限(HEL)信号而言，改进的 J-C 模型的计算结果要比 B-P 模型的结果更接近于实验数据；但对于低压卸载段信号而言，计算结果则相反，B-P 模型的结果要好于改进的 J-C 模型的结果。这是由本构模型的特点决定的：J-C 模型属于弹塑性模型，在加、卸载时，可以看到比较明显的“双波”(弹-塑性波)结构；而 B-P 模型则是典型的粘塑性模型，弹-塑性波结构不明显。

图 2 分别给出了冲击速度为 $u=705$ m/s 时不同时刻孔隙度和基体材料强度折减系数 $\delta(f)$ 的分布情况，并将两种基体本构模型的结果进行了比较。从图 2 中可以看出：

(1) 随着孔隙度 f 的增大，两种基体本构模型之间的差别越来越大；

(2) J-C 模型的局部化倾向比 B-P 模型明显一些。

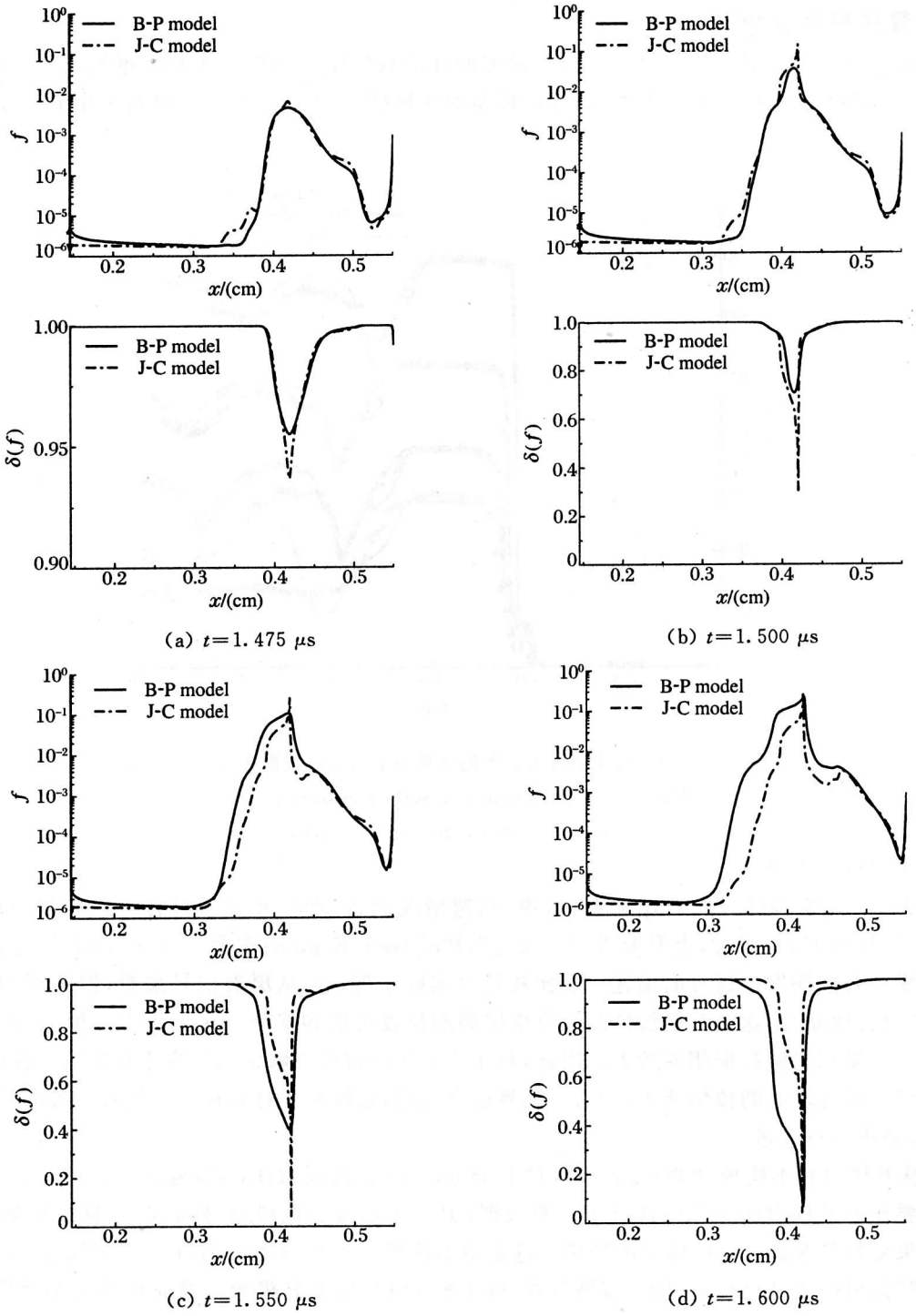


图 2 不同时刻的孔隙度(上)和基体材料强度折减系数(下)分布(u=705 m/s)

Fig. 2 Distribution of porosity and coefficient of matrix yield strength at different time

4 结 论

本研究采用连续介质力学基唯象模型,对钽的层裂实验进行数值模拟,并将数值模拟结果和相关实验数据进行了对比分析,结果表明,对于样品中的拉应力峰值明显高于材料层裂强度的实验,理论模型具有较好的预估能力,但对于临界层裂问题,该模型对材料损伤与失效过程的描述可能不够准确,需要进一步改进。

References:

[1] Qu N Q, Chen J L. The Application of Ta and Ta Alloys [J]. World Nonferrous Metal, 1999, 5: 37-41. (in Chinese)
屈乃琴,陈久录. 钽及钽合金的应用 [J]. 世界有色金属,1999,5:37-41.

[2] Zerilli F J, Armstrong R W. Dislocation-Mechanics-Based Constitutive Relations for Material Dynamics Calculations [J]. J Appl Phys, 1987, 61(5): 1816-1825.

[3] Meyers M A, Chen Y J, Marquis F D S, et al. High-Strain, High-Strain-Rate Behavior of Tantalum [J]. Metall Trans A, 1995, 26A: 2493.

[4] Chen S R, Gray G T Ⅲ, Bingert S R. Mechanical Properties and Constitutive Relations for Tantalum and Tantalum Alloys under High-Rate Deformation [R]. LA-UR-96-0602, 1996.

[5] Gourdin W H. Constitutive Properties of Copper and Tantalum at High Rates of Tensile Strain: Expanding Ring Results [R]. UCRL-98812, 1998.

[6] Duprey K E, Clifton R J. Dynamic Constitutive Response of Tantalum at High Strain Rates [A]//Schmidt S C, Dandekar D P, Forbes J W. Shock Compression of Condensed Matter-1997 [C]. New York: American Institute of Physics, 1998: 475-478.

[7] Duprey K E, Clifton R J. Pressure-Shear Response of Thin Tantalum Foils [A]//Furnish M D, Chhabildas L C, Hixson R S. Shock Compression of Condensed Matter-1999 [C]. New York: American Institute of Physics, 2000: 447-450.

[8] Thissell W R, Zurek A K, Tonks D L, et al. Experimental Quantitative Damage Measurements and Void Growth Model Predictions in The Spallation of Tantalum [A]//Furnish M D, Chhabildas L C, Hixson R S. Shock Compression of Condensed Matter-1999 [C]. New York: American Institute of Physics, 2000: 451-454.

[9] Tonks D L, Zurek A K, Thissell W R. Spallation Modeling in Pure Commercially Tantalum [A]//Staudhammer K P, Murr L E, Meyers M A. Proceedings of International Conference on Fundamental Issues and Applications of Shock-Wave and High-Strain- Rate Phenomena (EXPLOMET 2000) [C]. Albuquerque, USA: Elsevier, 2001: 517-523.

[10] Zurek A K, Thissell W R, Trujillo C P, et al. Damage Evoluton in Ductile Metals [J]. Los Alamos Science, 2003, 28: 111-113.

[11] Thissell W R, Tonks D L, Schwartz D S, et al. Dynamic Failure Resistance of Two Tantalum Materials with Different Melt Practice Sequences [A]//Furnish M D, Gupta Y M, Forbes J W. Shock Compression of Condensed Matter-2003 [C]. New York: American Institute of Physics, 2004: 495-498.

[12] Zhang L. The Responses of Ductile Materials to Shock Wave Loadings: A New Model for Prediction of Dynamic Damage, Fracture and Structure Phase Transition [D]. Beijing: Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 2005. (in Chinese)
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]. 北京:北京应用物理与计算数学研究所,2005.

[13] Liu H F. A Handbook on Equations of State for Variuos Materials [Z]. Beijing: Beijing Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, 2003. (in Chinese)
刘海风. 状态方程手册 [Z]. 北京:北京应用物理与计算数学研究所,2003.

[14] Rajendran A M, Grove D J. A Dynamic Failure Model for Ductile Materials [R]. AFATL-TR-90-84, 1991.

Numerical Modeling of Spallation Experiments of Tantalum

JIANG Song-Qing, LIU Wen-Tao

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

Abstract: A phenomenological model, which includes nonlinear elasticity (equation of state), rate-dependent plasticity, and void nucleation and growth, is provided for modeling the spallation behavior of tantalum. An implicit numerical technique, diagonally implicit Runge-Kutta method, is used to solve the constitutive rate-equations, and some improvements to the stability and accuracy of the solution are obtained. The model developed is used to simulate the plate impact experiments on tantalum. Comparisons are made between the model and the experimental data. Results show that close agreement between model predictions and experimental results is obtained for moderate or high velocity plate impact experiments, but some improvements in the model are necessary to predict the damage evolution and failure in incipient spall fracture of tantalum.

Key words: tantalum; spallation; rate-dependent plasticity; void; diagonally implicit Runge-Kutta method; thermoviscoplastic constitutive relation; incipient spall fracture