

粉末材料爆炸压实数值模拟*

张 德 良

中国科学院力学研究所, 北京 (邮政编码100080)

TF174.36

摘要 本文对粉末爆炸压实数值模拟作了系统评述。首先叙述了流体弹塑性体的模型、方程和计算方法; 然后对一些典型的程序编码作了介绍; 总结了粉末爆炸压实数值模拟最新进展; 最后, 对未来发展方向提出了我们的看法。

关键词 粉末爆炸压实; 数值模拟; 流体弹塑性体; 拉格朗日算法; 欧拉算法; 耦合算法

粉末冶金 爆炸力学 压实

1 引言

随着高技术的发展, 工程技术对材料提出越来越高的要求, 急需得到大量有特殊性能的合金和陶瓷等新型材料。近年来制造这些新型材料的加工技术特别引起人们关注。快速急冷凝固技术就是其中之一。和常规工艺相比, 这种工艺不仅由于使材料的微观结构发生了变化而使性能有较大的提高, 而且利用这种工艺还可以研制出有不同成份, 性能优异的新型合金, 从而为高科技领域研制新材料开辟了一条新途径^[1]。但是, 急冷凝固技术的基本原理决定了生产出来的材料只能是粉末、细线、箔片和薄带等。这些材料无法在工程技术上得到广泛应用, 因此必须对其进行压实和烧结, 使其具有一定3维尺度的结构材料。这就称为固结成形技术(或烧结成形技术)。

常规的固结成形技术主要采用静压高温法, 它的主要问题是加工过程中会使材料发生反应、相变和颗粒增长, 这样会使急冷凝固材料原有的许多优良性能完全丧失。爆炸压实是一种理想的快速固结成形技术。它以炸药为能源, 瞬时起爆后, 在极短时间内形成高温高压的极端状态, 当它作用到急冷凝固材料上, 表面迅速获得巨大能量, 引起快速塑性变形, 产生表面焊接和熔化烧结, 形成3维结构材料。爆炸压实技术最大优点是可以保持急冷凝固材料原有优良性能不变。

长期以来, 爆炸压实研究基本上以实验为主, 许多学者对此已作了大量实验研究, 取得了不少重要成果。Gourdin^[2]已对爆炸压实研究作了总结。Prümmer^[3]出版了《粉末材料爆炸压实》专著, 从实验的角度出发, 系统介绍了爆炸压实的基本原理、方法和应用。无疑, 这些研究成果对压实装置设计的改进, 实验和生产固结材料技术参数的控制, 以及能量在表面沉积机理的深入理解起了重要作用。然而, 为了彻底掌握爆炸压实技术, 光靠这些研究成果是远远不够的。随着计算机科学和计算方法的不断发展, 用数值模拟方法开展爆炸压实的研

* 本文得到863高科技项目部分资助。

充已成为一个极为重要的手段。从80年代以来，各国学者对爆炸压实的宏观效应和微观结构都进行了数值模拟，取得了突破性进展。特别是通过对微观结构的数值模拟获得了不少从实验中无法得到的信息，弥补了实验工作的不足，为在工程中推广应用，在生产实践中预报参数以及进行深入的理论研究带来了新的活力。

本文是关于爆炸压实数值模拟动态和进展的综述性论文。由于这方面的内容十分丰富，本文仅对粉末爆炸压实数值模拟作较系统的分析和总结。文章首先对爆炸压实加载设备作一个简单说明，然后对流体弹塑性模型和基本方程作一叙述，并对主要数值模拟方法、各种流行的程序编码进行分析和介绍，最后对爆炸压实宏观效应和微观结构数值模拟所取得的成果作了总结，对今后工作方向和研究难点提出了看法。

2 实验方法简介

现代工程技术所需的大量新型优质材料可用快速固结成型技术制成。爆炸压实方法是快速固结成型中一个较为理想的途径。它有以下几个优点：①炸药在极短时间内释放巨大能量，使粉末材料获得高温高压条件，可把粉末材料固结到密度值接近于理论值；②由于加载速率很高，因此固结后材料仍然能保持粉末原有的优良特性；③如果粉末为混合物或一些特殊材料，可能会引起相变或化学反应，使固结后的材料具有一些新的优异性能；④利用高温高压条件可合成新的材料；⑤实验设备简单，操作方便，费用低廉。

一般说来，爆炸粉末压实实验有直接法和间接法两种方法，而在实际应用中以直接法最为重要。下面重点介绍粉末爆炸压实直接法的一些基本实验设备。

2.1 滑移爆轰柱面加载设备 设备的基本结构如图1。在薄壁金属管内装入待压实粉末材料，金属管外面用均匀炸药层包围。在金属管顶部用雷管起爆，爆轰波沿管子轴向急速行进，管壁在爆轰波波阵面后的高压作用下将管内粉末材料压实。

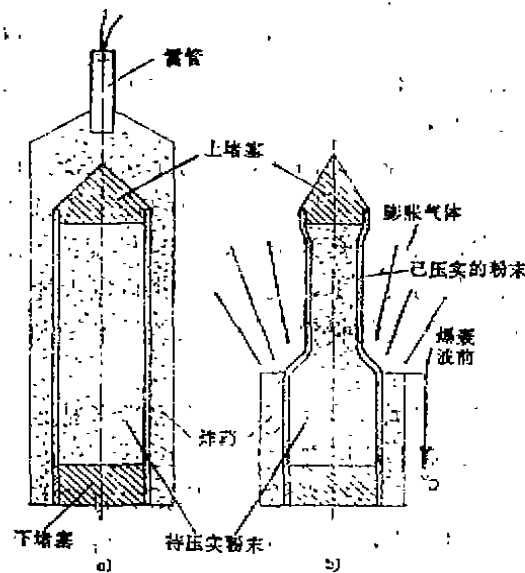


图1 用于粉末材料的直接爆炸压实装置。
a) 为引爆之前。 b) 为引爆之后 (Prummer)

2.2 平面飞板加载设备 所需压实材料被装在坚实基板上的4个容器里(图2)。这4个容器位于基板中心四周的对称位置上,这样可以避免在卸载过程中对角线方向的拉伸应力的影响。在基板上方覆盖一薄的飞板,用炸药驱动飞板,使其获得高速并直接撞击粉末材料,使其压实。

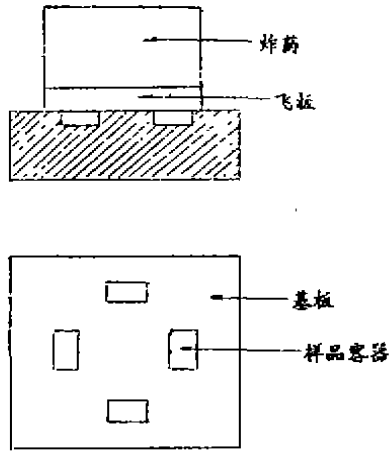


图2 平面飞板加载装置

2.3 轻气炮加载装置 基本原理和平面飞板方法类似,只是加载方法不同。使用轻气炮发射一弹丸,弹丸在高压气体驱动下获得高速,并直接撞击靶板(图3)。粉末被装在靶

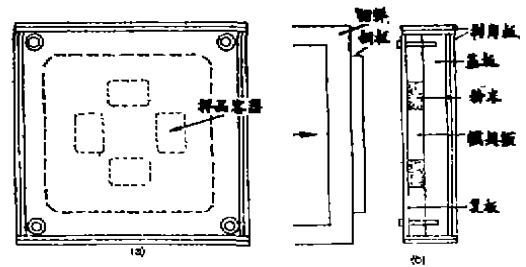


图3 用于粉末压实的轻气炮实验装置
(a) 靶板 (b) 弹丸撞击靶板

板的4个容器内。粉末材料在高速弹丸冲击下被压实。

粉末材料被压实后可以达到相当高的密度和强度。这表明压实并不仅仅把粉末挤压在一起,同时在粉末颗粒间也存在着强烈的相互作用。大量实验证实粉末压实有爆炸焊接、摩擦焊接和熔化烧结3个主要机理。此外,在冲击波作用下粉末还可能发生相变而产生新材料^[4]。如果粉末材料是混合物,还可能产生化学反应^[5]。

值得指出的是为了得到均匀密实的固体,并不是加载压力越高越好,必须根据粉末材

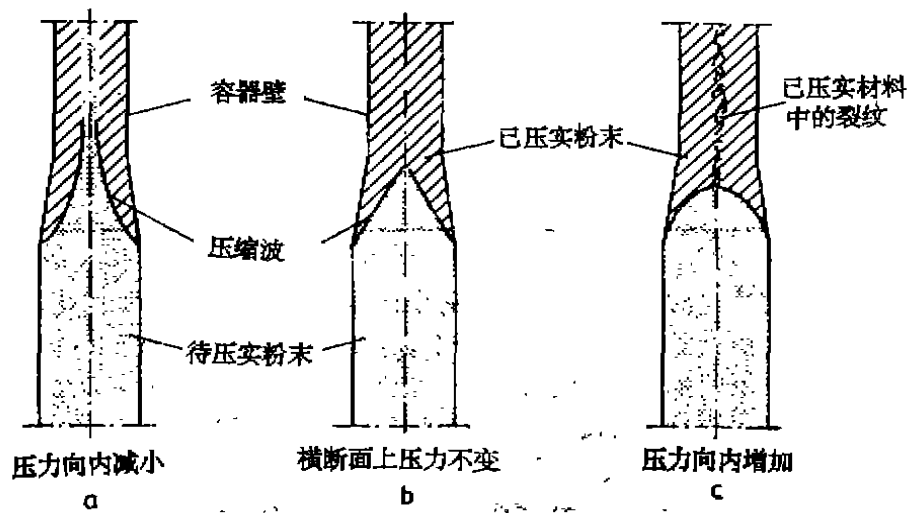


图4 在爆炸压实中冲击波前的不同形状(由a→b→c,炸药量和/或其速度(压力)增加^[3])

料特性来选择炸药类型和选择药量及与其相匹配的加载条件。图 4 是在不同压力条件下由 X 光照相获得的爆炸压实中冲击波前的不同状态。其中 (a) 没有被压实, (b) 压实效果较好, (c) 压实后产生裂缝。

3 数值模拟研究进展

3.1 流体弹塑性体模型 爆炸是在极端条件下把能量从一种形式转化为另一种或几种形式的过程, 并伴随有各种力学效应和强烈破坏。在爆炸过程的极短时间内 (微秒量级) 较小空间中释放出巨大能量和能量率, 致使在爆源周围的介质内形成极高压力和极高温度的冲击波, 冲击波从爆源向周围介质传播和扩展, 逐渐减弱。同时介质在冲击波作用下经历了大变形、相变和破坏的复杂过程。

爆炸初期在爆源附近, 由于冲击波作用极强而可以忽略介质强度效应, 因此可把介质看作是流体; 然而, 爆炸晚期在远区, 随着时间和距离增加, 冲击波强度逐渐减弱, 介质强度明显起作用, 甚至起着控制作用, 流动现象已不明显, 这时介质应视为固体。由此可知, 在爆炸过程中简单地把介质看作是固体或流体已不能反映这一复杂过程。为了反映爆炸早期和晚期, 爆源近区和远区介质所表现的连续而自然的过渡变化, 必须提出一个确切描述这一复杂过程的介质模型。1965 年郑哲敏^[8]在研究地下核爆炸力学效应时提出了**统一的流体弹塑性体模型**。

表 1 列出了在几种典型情况下, 爆炸早期在爆源附近介质中强度和压力的相对数值比较。数值表明, 像岩石、金属之类的固体在爆源附近也必须当作流体, 然而随着时间和距离增加, 介质强度逐渐起作用, 最后发展成起决定作用的因素, 此时就不能把它们看作流体了。

表 1 几种典型情况下 $Y, p, Y/p$ 的值¹⁾

类 型	$Y(\text{GPa})$	$p(\text{GPa})$	Y/p
地下核爆炸	0.5	10^3	5×10^{-4}
土岩爆破	0.01—0.5	5	$2 \times 10^{-3}—10^{-1}$
爆炸复合	1	10—50	$10^{-1}—2 \times 10^{-2}$
爆炸硬化	1	10	10^{-1}
陨石碰撞	0.1—0.5	$10^3—10^4$	$1^{-2}—5 \times 10^{-5}$
破 甲	1	$10—3 \times 10^2$	$10^{-1}—3 \times 10^{-3}$
穿 甲	1	5	2×10^{-1}

1) 表中 Y 表示介质特征流动应力, p 表示特征压力 [初压或特征动压, 即 $(1/2)\rho v^2$, ρ 为密度, v 为特征速度]。

和普通流体或弹塑性体相比, 统一的流体弹塑性体的运动有以下特征: ①在运动过程中流动应力所作的功使介质温度显著升高。温升引起压力和密度变化, 使流体弹塑性体剪应力和体积变形相耦合, 力学效应和热效应相耦合; ②流体弹塑性体的流动应力往往和温度、压力密切相关, 受它们的影响和制约; ③流体弹塑性体是连续自然过渡, 没有严格、明显的区分, 必须用统一的数学模型和统一的介质特性关系 (状态方程和本构关系) 来描述。

流体弹塑性体模型是描述爆炸过程的基础, 因此也是描述粉末材料爆炸压实过程的基础。粉末材料爆炸压实数值模拟正是在这个基础上进行的,

3.2 流体弹塑性体模型的数学描述^[7] 流体弹塑性体模型的核心内容是把介质的内应力 σ_{ij} 分解为各向均匀的静水压 $-p\delta_{ij}$ (负号表示应力是以拉应力为正) 与剪应力偏量 S_{ij} 之和, 以及把应变率 $\dot{\epsilon}_{ij}$ 分解为各向均匀比容变化率 $(1/3)(\dot{V}/V)\delta_{ij}$ 与反映畸变率偏量 $\dot{\epsilon}_{ij}$ 之和, 即

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + S_{ij} \quad (1)$$

$$\dot{\epsilon}_{ij} = 1/3(\dot{V}/V)\delta_{ij} + \dot{\epsilon}_{ij} \quad (2)$$

$$p = -\sigma_{ii}/3 \quad (3)$$

$$\dot{V}/V = \dot{\epsilon}_{ii} \quad (4)$$

其中 δ_{ij} 为单位矩阵。同时, 介质的静水压力应满足介质热力学状态方程, 即静水压 p 是比容 V , 比内能 E 的确定函数, 即 $p = p(V, E)$; 而应力偏量应满足介质受力和变形之间关系, 即应力偏量 S_{ij} 是应变偏量 ϵ_{ij} , 应变率偏量 $\dot{\epsilon}_{ij}$, 比内能 E 和表征破坏的特征量 k 的函数, 即 $S_{ij} = S_{ij}(\epsilon_{ij}, \dot{\epsilon}_{ij}, E, k)$ 。由此可以看出, 体积变化会影响压力和内能变化, 从而改变介质强度特性, 最终会影响介质畸变, 另一方面, 畸变消耗的塑性功使内能增加, 反过来又影响体积变化。这反映了在具有高速、高压、高温、大畸变等特征的爆炸和高速碰撞问题中, 用流体弹塑性体模型描述介质运动时在体积变形和剪切变形之间, 以及力学效应和热效应之间存在着强烈耦合作用。

在数学上, 爆炸问题可以用偏微分方程组和初边值条件来描述。它包括反映守恒律的基本方程和初边值定解条件两部分, 而基本方程又包括参与运动的介质的状态方程和本构关系。在忽略重力、粘性和热传导情况下基本方程和定解条件如下:

欧拉型微分形式基本方程

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (5)$$

$$\rho \frac{du_i}{dt} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij}) = 0 \quad (6)$$

$$\rho \frac{dE_T}{dt} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ij} u_j) = 0 \quad (7)$$

欧拉型积分形式基本方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dv = - \int_S (\rho u_i) n_i ds \quad (8)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho u_i dv = - \int_S p n_i ds + \int_S S_{ij} n_j ds - \int_S \rho u_j (u_i n_j) ds \quad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho E_T dv = - \int_S p u_i n_i ds + \int_S S_{ij} u_j n_j ds - \int_S (\rho u_i E_T) n_i ds \quad (10)$$

拉格朗日型微分形式基本方程

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (11)$$

$$\rho \frac{\partial u_i}{\partial t} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0 \quad (12)$$

$$\rho \frac{\partial E_T}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x_i} (\sigma_{ij} u_j) = 0 \quad (13)$$

拉格朗日型积分形式基本方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v(t)} \rho dv = 0 \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v(t)} \rho u_j dv = - \int_{s(t)} p n_j ds + \int_{s(t)} S_{ij} n_i ds \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{v(t)} \rho E_T dv = - \int_{s(t)} \rho u_i n_i ds + \int_{s(t)} S_{ij} u_j n_i ds \quad (16)$$

这里 x_i 是空间坐标, ρ 是密度, n_i 是单元面法线方向余弦, E_T 是单位质量总能量, $E_T = E + (1/2)u_i u_i$, E 为单位质量内能.

$$\text{状态方程} \quad p = p(\rho, E) \quad (17)$$

$$\text{本构关系} \quad S_{ij} = S_{ij}(\epsilon_{ij}, \dot{\epsilon}_{ij}, E, k) \quad (18)$$

应该说明, 这里对运动和变形的描写都是在小变形假设下成立. 计算动能转化时忽略了弹性变形能. 若介质为流体则令应力偏量为零. 一般情况下在数值模拟时弹性变形可用虎克定律描述, 塑性变形用理想塑性关系, 即 Von Mises 屈服准则来判别屈服是否发生, 然后用 Prandtl-Reuss 关系来描写屈服后关系. 对断裂的描述至今没有好办法, 常用极简单的近似方法, 例如用比容来判定是否发生拉断等, 但这些都无法确定断裂面形状.

定解条件包括初始条件和边界条件. 初始条件即是给定初始时刻介质的位形、速度和热力学状态; 边界条件则是各种不同性质边界有不同边界条件, 例如, 在刚性壁面上法向速度为 0, 在自由面上作用力为 0, 在介质交界面上给定滑动边界条件或摩擦条件等.

3.3 数值计算方法 在上述基本方程和定解条件确定后, 可以用欧拉法、拉格朗日法以及欧拉-拉格朗日混合方法求解.

3.3.1 拉格朗日法 此法采用拉格朗日坐标, 即把坐标固定在介质上, 随着介质一起运动. 一般把坐标和速度定义在结点上, 其余的物理量定义在网格边界上. 差分格式一般按如下两种方法把空间导数离散化.

①根据 Green 公式推导偏导数积分定义^[8]

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_{(x,y)} = \lim_{A \rightarrow 0} \left(\oint_C F dy / A \right) \quad (19)$$

$$\left. \frac{\partial F}{\partial y} \right|_{(x,y)} = \lim_{A \rightarrow 0} \left(\oint_C F dx / A \right) \quad (20)$$

其中 x, y 是平面或柱面坐标, $F(x, y)$ 是任一适当可微函数, A 是以 C 为周界, 包含 (x, y) 点的区域面积. 由此可把微分方程中的偏导数近似化为由网格结点所构成的围道积分.

②用拉格朗日坐标的微分变换关系导出欧拉导数的拉格朗日表达式^[9]

$$\frac{\partial F}{\partial y} = - \frac{1}{J} \left(\frac{\partial F}{\partial K} \frac{\partial x}{\partial L} - \frac{\partial F}{\partial L} \frac{\partial x}{\partial K} \right) \quad (21)$$

$$\frac{\partial F}{\partial x} = - \frac{1}{J} \left(\frac{\partial F}{\partial K} \frac{\partial y}{\partial L} - \frac{\partial F}{\partial L} \frac{\partial y}{\partial K} \right) \quad (22)$$

其中 K, L 是拉格朗日坐标, J 是坐标变换的雅可比行列式. 由此可把欧拉导数化成拉格朗日坐标中的微商, 然后差分化.

拉格朗日法的计算流程是, 从已知的 $t^{n-1/2}$ 时刻的速度 $\dot{x}^{n-1/2}$ 及 t^n 时刻的应力 σ_{ij}^n , 比容 V^n 和比内能 E^n 出发, 一方面由动量守恒方程计算 $t^{n+1/2}$ 时刻 $\dot{x}^{n+1/2}$, 进而得到比容的变化率 $(\dot{V}/V)^{n+1/2}$ 和应变率 $\dot{\epsilon}_{ij}^{n+1/2}$, 由此容易求得 t^{n+1} 时刻比容 V^{n+1} , 然后由畸变本构关系可求出应力偏量 S_{ij}^{n+1} . 另一方面, 可由能量守恒方程得到 t^{n+1} 时刻比内能 E^{n+1} . 最后由比容 V^{n+1} , 比内能 E^{n+1} 利用状态方程求得压力 p^{n+1} , 再利用已求得的 S_{ij}^{n+1} 得到 t^{n+1} 时刻应力 σ_{ij}^{n+1} , 比容 V^{n+1} 和比内能 E^{n+1} 及 $t^{n+1/2}$ 时刻 $\dot{x}^{n+1/2}$. 计算流程如图 5 所示.

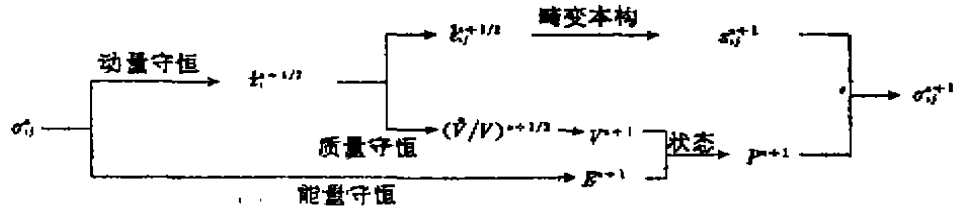


图5 拉格朗日法计算流程示意图

拉格朗日法具有方程形式简单, 记录质点运动轨迹方便, 处理多种介质界面运动容易等优点, 一般情况计算精度较高. 其根本性缺点是格元不能经受大的畸变. 如果畸变太大, 有可能使格元的某一边长缩得太短, 以致由稳定性条件求得的计算步长很小, 甚至会使四边形网格格元进一步扭成麻花状而使格元面积变负. 为了克服格元畸变带来的困难, 一般采用滑动边界的解耦处理^[10], 或者重分网格^[11]. 后者是把已产生畸变的网格区域重新设计成正常网格, 其上每个格元的值由原网格上格元的值插值而得. 但无论用哪种方法编制程序都很复杂.

3.3.2 欧拉方法 此法取固定在空间的欧拉网格. 由于网格固定, 介质产生相对于它的运动, 所以在格元边界上会有质量的输入和输出, 随之也会有动量和能量的输入和输出.

算子分裂方法在欧拉计算中应用极为广泛^[12]. 它的基本思想是, 在守恒方程左端只保留变量对时间偏导数一项, 把所有其他物理效应项都移到守恒方程右边, 然后分步计算. 设想在一个时间步长内把方程右边的各项物理效应, 例如压力效应, 应力偏量效应, 对流效应 [方程 (8) — (10)] 完全分开; 然后按一定次序逐个单独计算. 具体计算步骤如下: 由 n 时刻速度 u_i^n 计算 $n+1$ 时刻速度 u_i^{n+1} . ①先计算压力效应, 即令应力偏量项和对流项为零, 速度由 u_i^n 过渡到 \bar{u}_i^n . ②计算应力偏量效应, 即令压力项和对流项为零. 速度由 \bar{u}_i^n 过渡到 \tilde{u}_i^n . ③最后计算对流效应. 这时令压力项和应力偏量项为零, 速度由 \tilde{u}_i^n 得到 $n+1$ 时刻 u_i^{n+1} . 其他物理量计算步骤也类似. 如果问题比较复杂, 除了上述 3 个物理效应以外, 还要考虑其他效应. 例如热辐射, 重力等, 仍可按此原则分裂成更多步数计算. 近年来数值理论进展也推动了算子分裂法进一步推广. 不仅对物理效应可以有算子分裂, 对空间维数也可以进行算子分裂^[13], 即可以把一个 2 维空间问题分裂成两个 1 维问题来计算. 为了避免由于计算次序而引入人为因素, 可以采用次序交错的算法. 即在第一个计算步内的次序和第二个计算步内的计算次序交错进行.

数学上严格地说，把非线性偏微分方程各项分开计算是不成立的，计算结果也不一定收敛于原方程。有关算子分裂的数学理论正在深入探讨，已有人对算子分裂法的相容性作了论证^[14]。但从大量计算实践来看算子分裂法是可行的，许多复杂问题的计算结果和实验结果符合相当好。由于算子分裂法计算方便，编制程序简单，因此是一个比较实用而有效的方法。

由于欧拉方法中网格固定不动，而介质在网格中流动，所以对格元的大畸变是有限制的。但是这对区分自由面或多种介质界面却有困难，因为计算中对一个格元内只定义一组状态参数，如果一个格元内具有多种介质，则各种介质便具有相同状态参数，根本无法辨认它们；其次，由于不知道各种介质之间的界面确切位置和取向，所以也不可能对界面进行准确的边界条件（例如滑动边界条件，摩擦边界条件）计算。此外，在自由面附近将出现伪扩散现象（也称数值扩散）。既然自由面所在格元内存在的介质都有一定速度值，则在同一时间内都必然向它邻近的外围空格输送质量、动能和能量，这样在计算结束时这个空格就立即变成新的自由面所在格，依次计算下去每算一步自由面就要扩充一格，介质的体积就发生一次非物理性因素的扩散。由此可知，用欧拉方法计算自由面不可能得到精确的形状和位置。

为此人们不断改进计算界面（自由面）的方法。最有代表性的工作是采用示踪质点法^[16]。它的思想是在界面上设置一组无质量又不参与动力学计算的示踪质点，按一定原则来确定这些示踪质点的位置，从而改进界面的计算进度。但这种方法程序编制十分复杂，计算量大。

3.4 典型的计算编码 无论是欧拉方法还是拉格朗日法，多年来在实践中都已得到广泛应用，尤其在爆炸力学领域。许多典型的行之有效的大型程序编码已被编制成功。它们功能完备，各具特色，已得到广泛的推广应用。用户可以根据自己的需要来挑选使用。

3.4.1 HEMP 编码和 Toody 编码 HEMP 编码^[16]是 M. L. Wilkins 在 60 年代编制成功的著名拉格朗日法显式有限差分程序编码。经过大量实际算例的考验，效果较好。

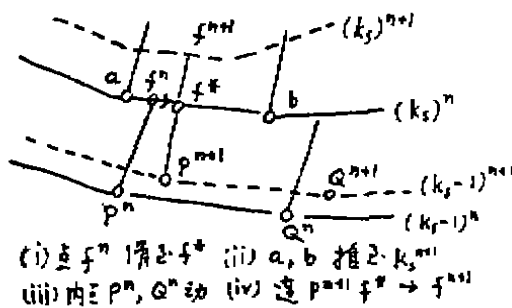


图 6 滑动边界计算步骤

HEMP 编码的一个最大特点是比较成功地把两种介质界面的计算作了解耦处理。具体做法如下：以一种介质作为主体，其界面称为主面，而另一种介质作为从体，其界面称为从面。在一个时间步内，首先设主面固定不动，界面上的节点 f^n 在从体应力差的作用下，沿主面滑动到 f^* ；接着，主面 $(k_s)^n$ 随主体单元在主体和从体之间的应力作用下移动到新位置 $(k_s)^{n+1}$ ；然后从体内点 P^n 按内点差分格式移动到 P^{n+1} 位置上；最后，

根据 $P^n f^*$ 是物质线的性质，在 P^{n+1} 和 f^* 之间连直线，并延长与主面 $(k_s)^{n+1}$ 相交，认为所得交点 f^{n+1} 乃是界面上节点的新位置（图 6）。

重分网格技术是拉格朗日法中克服大畸变的一个行之有效的方法。在 HEMP 编码基础上发展起来的 Toody 编码^[17,18]对重分网格技术作了推广和完善，可以自动地处理各种大畸变网格，成为在这一方面很有特色的另一个拉格朗日编码。但由于新的正常网格中每一个格元

都覆盖在几个老的畸变格元上，在计算新格元内的物理量时必须涉及几个老格元内物理量，而每个老格元内介质所经历的历史各不相同，所以计算十分复杂。此外，重分网格技术实际上采用了欧拉法中一些思想，因此也会给计算介质历史和处理多种介质界面带来一定的误差。

3.4.2 EPIC 编码和 DYNA 编码 有限元法的发展使它在非线性连续介质的波传播问题中得到了广泛应用。对于具有大畸变的弹塑性流动问题来说，有限差分法和有限元法实际上十分相似，因为它们都是拉格朗日方法。但是，采用三角形格元的有限元法能较好适应流动的大畸变，这是因为在大畸变时三角形格元具有较强的阻止节点靠近格元对边的能力。很明显，当一个节点接近于三角形格元对边时三角形格元的面积会趋于零，根据本构关系压力和体积成反比，因此，一旦格元面积趋于零，压力就会趋于无穷大，这种情况是不允许在格元中出现的。而对于四边形来说情况却不同，图 7 给出了四边形格元畸变的情况。这三个四边形格元都具有 A_0 的面积，图 7(a) 表示初始时刻安排的矩形格元；图 7(b) 表示节点 j 和 m 已重叠的变形格元；图 7(c) 表示格元已交错重叠和畸变，它的面积还是存在，等于二个三角形面积之差，即 $(A_1 - A_2)$ 。在计算中常常会出现图 7(b)，7(c) 的变形。但在四边形格元情况下这些格元变形受应力偏量控制，而应力偏量仅仅和介质强度有关，因此不可能像三角形格元那样具有阻止格元畸变能力。一旦这些畸变出现，计算公式就会失效，数值不稳定就会产生。

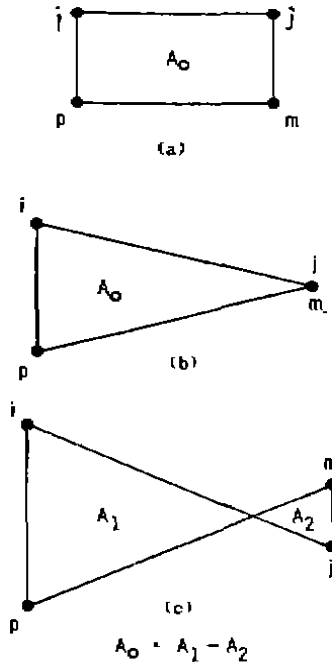


图 7 矩形格元可能变形方式

由 G. R. Johnson 编制的 EPIC 编码^[19]是一个具有较强处理畸变能力的三角形有限元编码。两种介质的质点不论在界面上相互滑动，还是界面质点互相脱离或互相侵入，EPIC 编码都可以处理，因为在编码中包含了一种称为“侵蚀”功能的算法^[20]。当格元的塑性应变超过一定值或体应变超过一定值时格元会有剪切和拉伸破坏。对已破坏格元内的物理量必须重新调整。如果这些破坏单元在界面上出现，则要把这些破坏格元“侵蚀”掉，重新定义“主面”和“从面”上节点，修正界面的位置和形状。这有效地提高了计算界面的精度。

最后必须指出，EPIC 编码虽然对克服大畸变有较强能力，但是，畸变特别严重时仍会有克服不了的困难。为此和 HEMP 编码一样需要用重分网格技术。DYNA 编码就是在 EPIC 编码基础上改进和完善重分网格技术的有限元编码^[21]。

3.4.3 HELP 编码和 SOIL 编码 HELP 编码是一个著名的欧拉法编码，它是 L. J. Hageman^[22]在计算流体力学问题的欧拉-拉格朗日混合的 PIC 编码^[23]基础上发展而成的。在 PIC 编码中连续介质被划分成小的质团，然后按照算子分裂思想建立差分格式并完成计算。PIC 编码具有明显的拉格朗日计算特点，但计算十分繁杂。为此 OIL 编码又把

PIC编码中离散小质团改成连续介质来计算,这就大大减少了工作量,而且又能适用于可压缩性较小的低速流量问题。但是OIL编码却失去了拉格朗日法的特点,HELP编码的目的是恢复PIC编码处理多种介质的功能,并保留OIL编码计算简便的优点。HELP编码是1阶欧拉型有限差分程序。

准确描述界面和自由面运动必须详细知道界面和自由面位置,这在纯欧拉法中是不可能做到的。为此HELP作者抛开欧拉法经典的观点,在自由面和界面上设置了一系列既无质量也不参与动力学计算的示踪质点,由它们来跟踪界面和自由面运动。这样既产生拉格朗日随体坐标的效果又不失掉欧拉法处理大畸变的特色;在一定程度上还避免了自由面上的扩散现象。

在HELP编码基础上W. E. Johnson发展了1阶欧拉型有限差分SOIL编码,可以适用于1维、2维和3维问题。它的特点是推广应用算子分裂思想,不仅对物理效应进行分裂,同时对空间维数也进行分裂,这样使计算得到简化。SOIL编码可以对含有4种介质的物理问题进行计算,还有完整的前处理和后处理程序包,因此,这个编码具有广泛的应用前景。

3.4.4 CSQ II 编码 为计算2维运动而设计的CSQ II编码是一个有多种用途的具有2阶精度的欧拉型有限差分编码^[24]。它是S. L. Tompson建立、修改和推广的,目前已有处理10种介质的能力,是现在应用最广泛的编码之一。

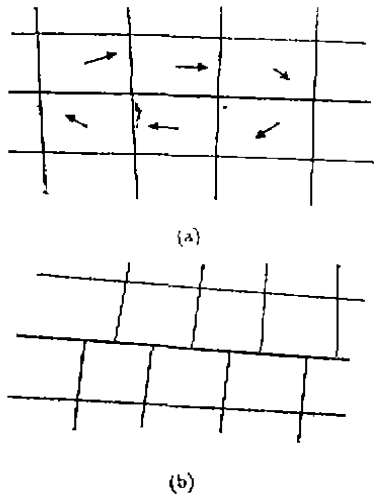


图8 (a) 原始欧拉网格和速度矢量;
(b) 拉格朗日运算后网格

CSQ II是一个欧拉编码,但和HELP、SOIL编码不同,它的解法是从拉格朗日型守恒方程出发,积分有限差分格式得到的。整个计算可由3步完成:①积分拉格朗日型守恒方程,得到中间物理量;②重分网格,把拉格朗日计算结果重新分配到欧拉网格上(图8);③计算欧拉网格上流动物理量。

CSQ II编码的另一个特点是具有十分完整的介质模型资料,可以为各种目的应用服务。状态方程具有分析形式和数据表格两种,介质可包含10种成份,既可以是固体,也可以是粉末介质及多孔介质,同时状态方程中包含了固-液,固-气,液-气等相变过程。编码可以处理混合格元和空格元。对于热辐射、热传导和重力效应也在编码中得到反映。

CSQ II编码仍然采用算子分裂算法,但不仅对物理效应进行了分裂,而且对空间维数也进行分裂,这给计算带

来了方便。

最初的CSQ编码是1阶精度的有限差分程序,其中每个格元内物质均匀分布,为了提高计算精度,80年代初改进成了CSQ II^[25],在每个格元内物质采用线性分布,这样计算精度可达到2阶精度。近年来在此基础上又发展形成CSQ III编码^[26],使CSQ方法成为较完整的应用广泛的程序。

3.4.5 CTH编码和CAVEAT编码 众所周知,从拉格朗日方法转变为欧拉方法会引起两个主要问题。①界面轨迹处理问题;②格元边界上流体对流输运计算精度问题。上述的

HELP 编码、SOIL 编码、CSQ π 编码等欧拉算法都没有很好解决这些问题。近年来，人们主要在这方面作了努力，已取得了明显进展，最有代表性的是 CTH 编码^[27]，CAVEAT 编码^[28]。它们都是具有 2 阶精度的有限差分的欧拉型算法。它具有各种复杂的介质模型，可以计算 10 种介质界面问题。

CTH 编码和 CAVEAT 编码的基本思想来源于 D. L. Youngs^[29] 的研究工作。为了说明 CTH 编码和 CAVEAT 编码思想，首先介绍 Youngs 的基本观点如下：①关于界面处理问题。Youngs 认为每一个格元内包含有两种介质 A 和 B，它们的界面用直线来近似，这可以由图 9 表示。在这个单元内介质 A 的体积百分数是和包围它的 8 个单元内的介质 A 的体积百分数有关。根据这 8 个单元内介质 A 的体积百分数来确定界面位置。

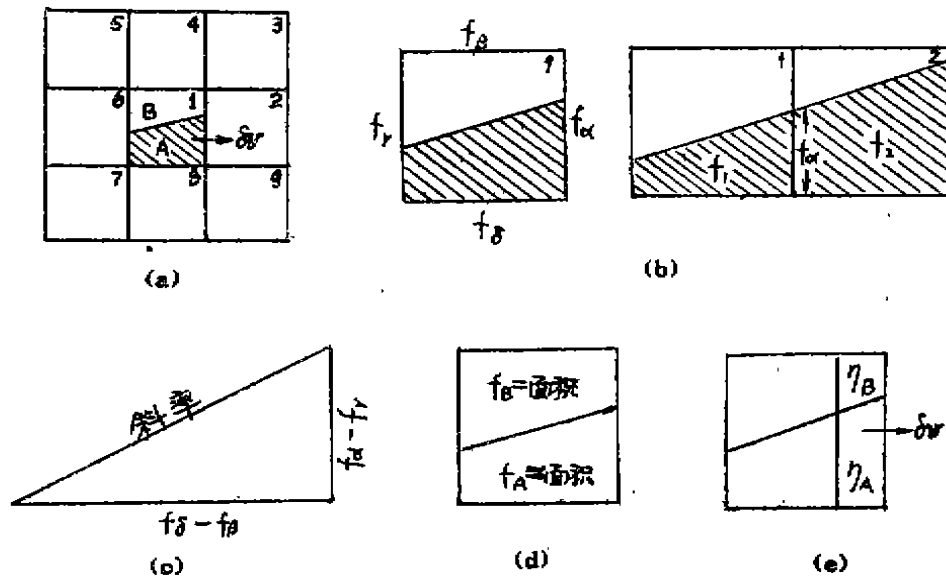


图 9 计算格元内多种介质界面流程图

(a) 9 个格元的体积分数通常由中心格元的界面斜率来确定；(b) 计算中心格元四边的体积分数通常由相邻格元的 f 求得；(c) 把格元作为正方形计算界面斜率；(d) 把界面所占有的位置调整到和体积分数比例一致；(e) 体积分数 δv 被分成二种介质： $\eta = \delta v / v$ ， $\delta v = \delta v_A + \delta v_B = \eta_A \delta v + \eta_B \delta v$

②对流输运计算问题。采用算子分裂方法，2 维格元的对流输运计算被分裂成 2 个 1 维格元的对流输运计算。即在 x, y 方向单独进行对流输运计算。1 维问题的质量守恒方程为：

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \quad (23)$$

它的守恒型差分格式为

$$\rho_{i-1/2}^{n+1} - \rho_{i-1/2}^n - u_{i+1/2} \frac{\rho_{i+1}^n - \rho_i^n}{\Delta x} = 0 \quad (24)$$

在 Δt 时间步内，流过单元边界 j 的质量为 $\bar{\rho}_j u \Delta t$ ，密度 $\bar{\rho}_j$ 可由下式给出

$$\bar{\rho}_j = \rho_{i-1/2}^n + \frac{1}{2} (1 - \eta) \Delta x D_j \quad (25)$$

其中 $\eta = u\Delta t/\Delta x$, $\rho_{j-1/2}^n$ 是 n 时刻在边界 j 上游格元的密度值, $D_j = \partial\rho/\partial x$ 表示上游单元内密度梯度, D_j 可由以下几种方式选择:

$$1 \text{ 阶} \quad D_j = 0 \quad (26)$$

$$2 \text{ 阶} \quad D_j = \frac{\rho_{j+1/2} - \rho_{j-1/2}}{\Delta x} \quad (27)$$

$$3 \text{ 阶} \quad D_j = \frac{2-\eta}{3} \frac{\rho_{j+1/2}^n - \rho_{j-1/2}^n}{\Delta x} + \frac{1+\eta}{3} \frac{\rho_{j-1/2}^n - \rho_{j-3/2}^n}{\Delta x} \quad (28)$$

1 阶精度表示格元内密度均匀分布, 这种格式引起的数值扩散较严重, 计算效果不好。2 阶精度表示格元内密度线性分布, 3 阶精度表示格元内密度 2 次分布。这样, 格元边界上的对流输运数值扩散就能被抑制住。虽然如此, 计算中仍会引起局部物理量振荡和负密度效应, 这些都需要引入必要的熵条件来克服。

CTH 编码和 CAVEAT 编码的计算思路基本上和 CSQ II 编码类似, 即整个计算分 3 步来完成, 即拉格朗日计算, 重分网格和欧拉计算。但是, CTH 编码和 CAVEAT 编码还有以下特点: CTH 编码的拉格朗日计算采用守恒的有限体积法, 计算对流输运采用 Van Leer^[30] 2 阶差分格式, 而 CAVEAT 编码的重分网格用多边形网格和连续重分网格技术, 计算对流输运运用 Godunov^[31] 2 阶差分格式, 因此 CTH 编码和 CAVEAT 编码具有较好的计算效果和广泛应用前景。

3.4.6 HULL 编码 除了上述的一些单一的欧拉编码和拉格朗日编码以外, 一些耦合欧拉-拉格朗日的计算编码也相应得到发展。由于耦合的原则各不相同, 耦合计算编码也完全不同, 比较有代表的是 HULL 编码^[32]。HULL 编码是一个十分复杂的程序系统, 采用显式有限差分计算格式, 在计算中可以定义欧拉区域, 也可以定义拉格朗日区域, 所以既可以处理欧拉计算, 又可以处理拉格朗日计算, 对于欧拉和拉格朗日联接区域的计算也比较容易完成, 因此, 计算十分灵活方便。在整个计算中一般可设 1 个欧拉区域, 10 个拉格朗日区域。

在欧拉区域采用任意的 1 阶或 2 阶差分格式, 而拉格朗日区域主要采用 Toody 编码算法。近年来为了连接 EPIC 编码, 对 HULL 编码已作了改进^[33]。为了提高计算多种物质界面的计算精度, 在欧拉区域内采用扩散限制器, 而在拉格朗日区域内采用主从面滑移面处理技术。

3.4.7 3 维编码 10 年前人们主要兴趣集中在 2 维问题的数值模拟上, 对于 3 维问题简直不敢问津。随着计算机科学的发展, 许多巨型计算机, 例如 CDC-7600, CRAY 等和巨型微机, 例如 UNIXAC1108, VAX 等大量出现, 3 维问题数值模拟已成为可能。80 年代以来许多大型 3 维问题编码已纷纷出台, 它们大都是在原来的 2 维问题编码基础上扩展改进得到。其中有: ①拉格朗日型编码: HEMP 3D (3 维 HEMP 编码); EPIC 3D (3 维 EPIC 编码); DYNA 3D (3 维 DYNA 编码)。②欧拉型编码: METRIC (3 维 HELP 编码); TRIOIL/TRIDORF (3 维 SOIL 编码); K3 (3 维 CSQ 编码); MESA3D^[34] (3 维 CTH 型编码) ③偶合型编码: HULL 3D。

对于 3 维问题编码最重要的是必须具有灵活的网格生成技术和先进的前处理和后处理程序包。因为在 3 维问题数值模拟中人们不能想象花几周的时间用人工来输入初始数据, 也绝不可能用人工方法来处理大批计算结果和绘图。从目前国内计算机条件来看, 类似于爆炸这

类问题的 3 维数值模拟还有相当大的难度。

3.5 粉末材料爆炸压实数值模拟 粉末材料爆炸压实是人们十分感兴趣的重要课题，它有着十分广泛的应用前景，因此一直受到材料科学工作者的关注。然而，长期以来爆炸压实的研究重点一直在实验方面，数值模拟工作几乎无人问津，直到 80 年代初才开始受到重视。经过 10 年的努力，粉末材料爆炸压实数值模拟所取得的成果是令人鼓舞的，特别在微观结构的数值模拟方面已取得了突破性进展。下面简要介绍近 10 年来所取得的进展。

3.5.1 宏观效应数值模拟 粉末材料爆炸压实数值模拟工作是 M. L. Wilkins 在 1982 年开始的^[36]。到 80 年代初关于粉末材料爆炸压实的实验工作已大量进行。从实验结果中可以发现，在压实的固体内常常会出现裂隙或孔洞，这将严重影响固体的质量。人们十分关注，这些裂隙和孔洞是什么原因形成的？在什么条件下才能得到高质量的固体？当时，由于进行测量非常困难，对这些问题很难得到确切的答案。唯一的方法是通过大量实验来总结规律，这是十分费时费力费钱的工作。因此人们寄希望于数值模拟。Wilkins^[36]首先用自己编制的 HEMP 编码对滑移爆轰柱面加载铜粉爆炸压实实验进行了数值模拟。图 10 给出两个典型的爆炸压实算例。图 10(a)是把炸药直接放在铁管外面，在铁管内直接装铜粉；图 10(b)是在铁管和装铜粉容器之间有一个间隙。这两个实验都具有一个铝的轴芯。

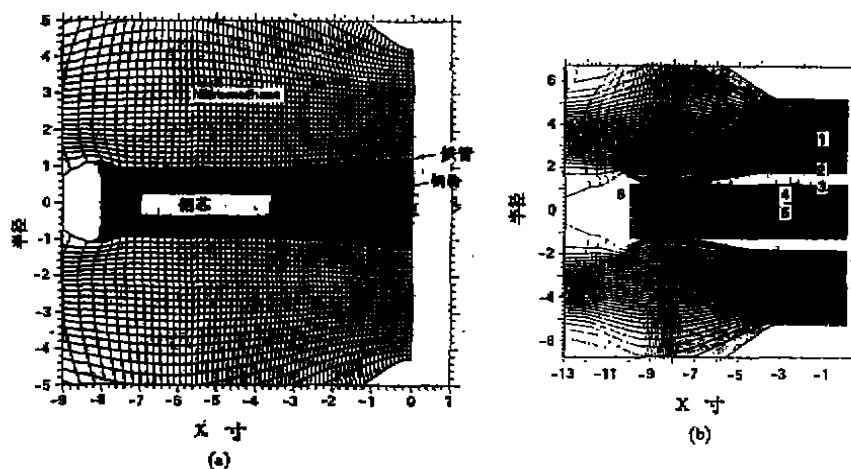


图 10 (a) 无间隙铜粉爆炸压实 (b) 有间隙铜粉爆炸压实
1 炸药 2 铁管 3 装粉容器 4 铜粉 5 铝芯棒 6 堵塞块

Wilkins 在数值模拟中采用如下介质模型。粉末用描述多孔介质的 p - α 模型。其他固体例如铁管、铝芯等用一般固体状态方程，即 Grüneisen 状态方程。炸药是用 JWL 产物状态方程。为了弄清各种实验参数对爆炸压实的影响，Wilkins 完成了以下数值模拟：①不同粉末介质（铜粉、玻璃粉、陶瓷粉）爆炸压实；②不同状态方程和屈服强度效应；③平面问题和轴对称问题计算；④间隙效应计算；⑤轴芯效应计算。由计算可以得出以下结论：①在爆炸压实过程中屈服强度是一个重要参数，而粉末状态方程对压实效果不敏感；②在压实过程中从铁管表面到粉末轴芯，压力峰值变化十分激烈，越靠近轴芯，压力峰值越高，而且轴芯附近的压力峰值和炸药厚度密切相关；③间隙的存在可以提高粉末内压力峰值，控制间隙大小就能控制固体质量；④轴芯的存在对于形成马赫孔有重要影响，采用低阻抗的轴芯可以避

免出现马赫孔。

与此同时, R. A. Berry 和 R. L. Williamson^[39]用CSQ II 程序编码完成了另一种爆

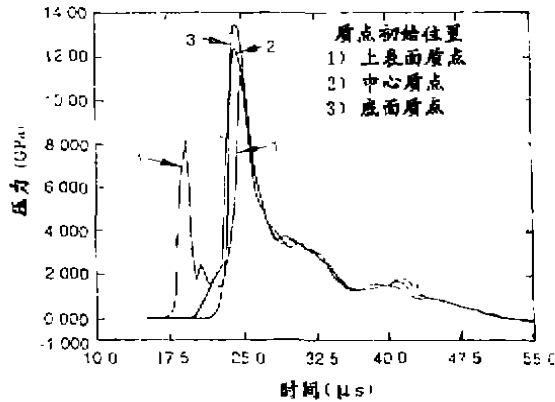


图 11 在不同位置上颗粒的压力历史

炸压实装置——平面飞板撞击压实的数值模拟。计算是对304不锈钢和6061铝粉进行的。在粉末介质模型中考虑了粉末部分地或全部地被压碎的不可逆过程。粉末被看作是未压碎粉末和已压碎粉末的一种特殊的混合物。在压实过程中, 用一个转换系数(质量百分数)来表示从未压碎粉末转变成已压碎粉末的不可逆过程的程度。对于未压碎的粉末和压实的固体分别用两种不同的状态方程来表示。计算给出了粉末内不同位置(上表面、中心和下表面)颗粒的压力历史(图11)。根据计算结果, 可以预报或判断在什么条件

下粉末已被压实。

从这些研究可以得出, 用计算机数值模拟粉末爆炸压实是可行的。利用计算机实验可以预报爆炸压实试验和设计试验方案。但是这一阶段的数值模拟是初步的, 对计算结果的分析也是不充分的。在这些计算的基础上, J. E. Reaugh^[38, 39]系统地开展了试验参数对压实效应影响的深入分析, 为深入理解爆炸压实机理提供了一些有价值的结论。Reaugh的工作分成试验参数效应研究和试验装置分析两部分。计算仍采用Wilkins的HEMP程序编码。介质模型是一个考虑了压实效应的Maxwell状态方程。计算结果指出, ①爆炸压实的效果可以由一个重要参数 E/M 来控制, 其中 E 是炸药的质量, M 是粉末质量。对于滑移爆轰, E/M 存在一个最佳值。但是 E/M 不是一个独立的参数, 它受炸药种类和材料特性的制约, E/M 仅是这些参数影响的综合效应。②为了得到完全均匀、无孔洞的烧结体, 爆炸压力必须达到一定的值。但是, 粉末介质的每一颗粒既受到冲击波加载, 又受到反射的稀疏波卸载的作用。炸药爆速越高, 冲击波加载就越强, 此时反射的稀疏波影响也增强, 这将会使压实的粉末再次离散。因此, 一般说来, 不宜采用高爆速炸药。③影响爆炸压实的重要因素是颗粒表面加热、熔化和卸载时急剧冷却的速率, 但是目前的各种状态方程都没有考虑到这些因素, 因此目前的数值模拟仅仅反映了粉末的压实而没有反映烧结。这表明, 为了正确模拟爆炸烧结, 必须对介质模型作更完善的描述。但在目前情况下, 采用一种合理地反映压实效应而又十分简洁方便的模型是合适的。④不同装置的数值模拟结果表明, 在无轴芯情况下粉末压实对装置几何参数、炸药特性的影响十分敏感, 一般很难得出最佳 E/M 值, 在轴芯附近容易产生马赫孔, 而在有轴芯时爆炸压实效应稳定, 对于平面飞板撞击试验也容易达到良好的效果, 作为应用来说, 这是十分有利的。

近期 A. P. Mann等人^[40]采用简单的流体模型对爆炸压实进行了数值模拟。计算结果表明, 就定性来说正确反映了压实过程, 可取之处是模型简单, 计算量远小于HEMP, CSQ II。

3.5.2 微观结构数值模拟 上述的爆炸压实宏观效应数值模拟是十分必要的, 但是对

理解爆炸压实内在机理、颗粒间相互作用以及能量在颗粒表面沉积状况是远远不够的。为此，R. L. Williamson 和 R. A. Berry^[41] 在 1987 年首先发表了爆炸压实微观结构的数值模拟，大胆地提出了用连续介质力学模型来描述和模拟微观的颗粒间相互作用。

图12表示一平板以 1km/s 飞行速度撞击几个 304 不锈钢颗粒，使它们变形、升温、压实、烧结的装置，75 μm 的颗粒放在刚性壁面的容器内。为了计算简化，球形颗粒用无限长的圆柱来代替，这样数值模拟被简化成 2 维问题。

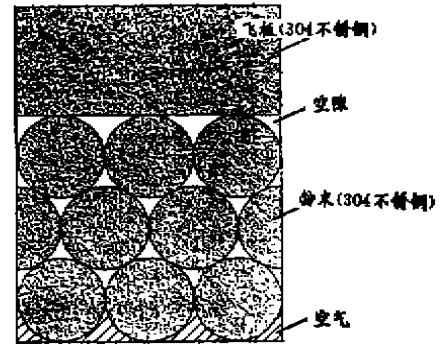


图 12 微观结构数值模拟示意图

颗粒变形和压实过程用连续介质力学方程组来描述。颗粒状态仍用一般固体状态方程来描述，但考虑了固-液相变效应与强度和温度的关系。本构关系是用弹性、理想塑性模型，不计及硬化过程。在整个压实过程中忽略颗粒间的剪切效应及摩擦力作用，同时热分析表明，热传导和热辐射在能量沉积中占的比例很小，所以也是忽略不计的。颗粒的冲击压缩关系仍采用线性的激波速度和质点速度关系。

为了考虑颗粒间空隙内气体效应，在容器底部 4 个空隙内充入了空气，剩余的空隙是真空的，以便于对照。

计算是用欧拉型 CSQ II 编码完成的。为了反映颗粒间相互作用和断裂效应，编码内加入了界面跟踪程序。初始条件是由另一个拉格朗日 1 维编码单独完成。计算网格为 80 \times 82 个，每个网格为 2.8 μm ，所以每个颗粒大约占有 26 个网格。图 13 给出了压实过程、颗粒变形和挤压状态。图 14 给出了颗粒内部不同位置的温度历史。图 15 给出了压实过程中变形和液化状态。计算结果表明，①压实过程中颗粒发生了大的变形，甚至液化，形成射流充填空隙，但颗粒没有大的位移，变形仅仅发生在颗粒表面附近。颗粒大约在 60ns 时间内就完全压实了。②颗粒表面由于大变形而产生高温，温度可达到 7000K 左右，远远超过液化温度 (950 K)，证明颗粒表面已被液化，而在颗粒内部温度只有 480 K 左右，不仅没有液化，也没有发生微

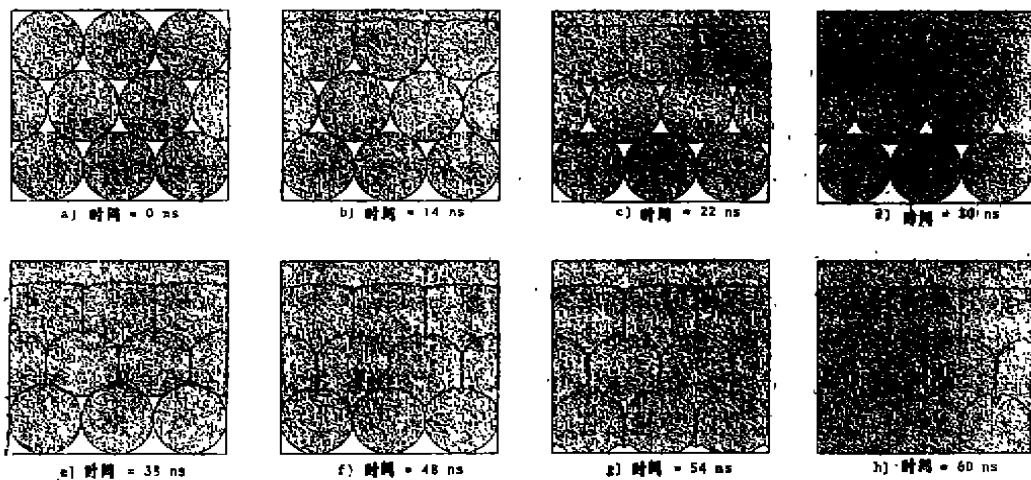


图 13 爆炸压实颗粒变形、挤压数值模拟结果

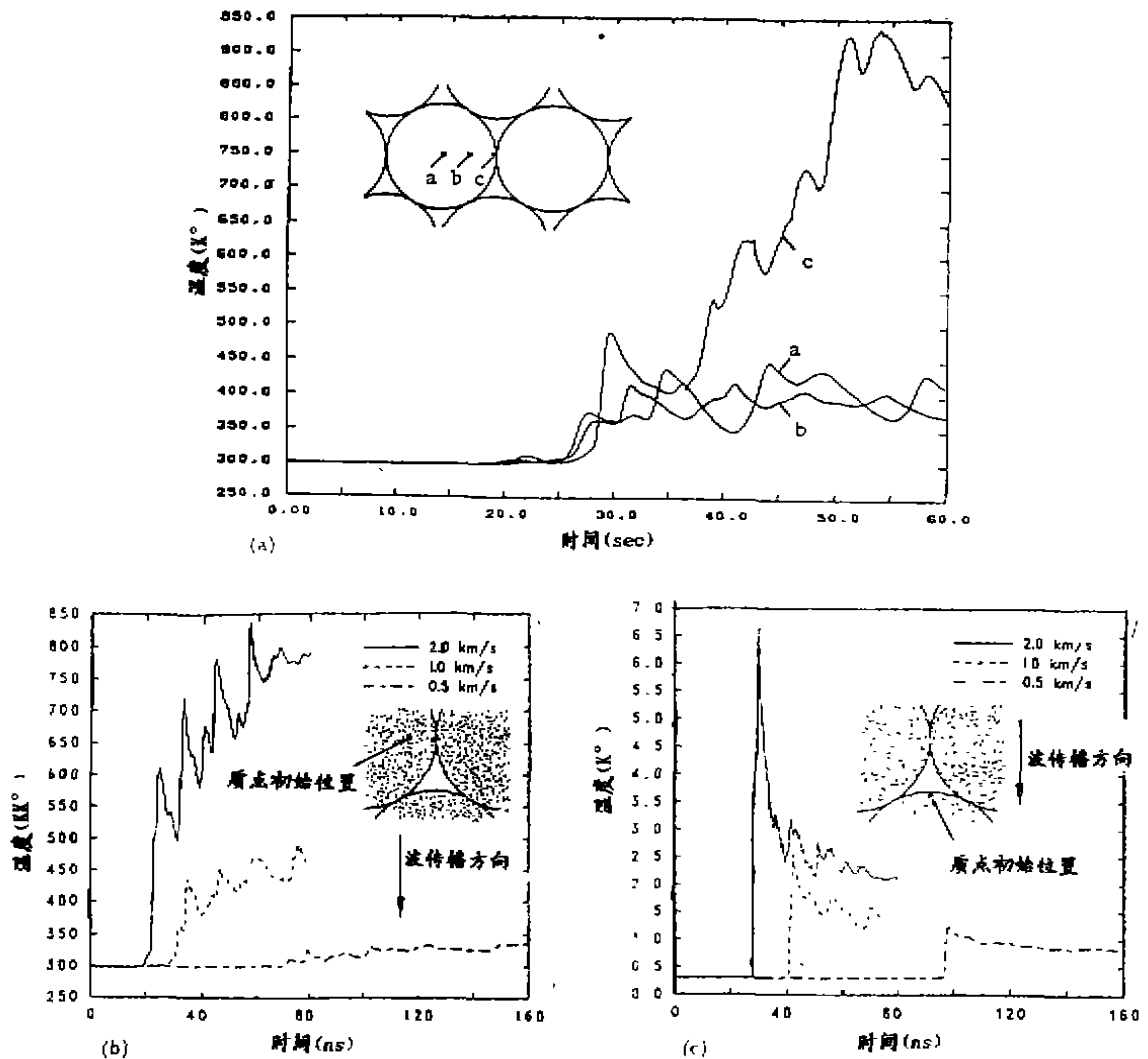


图 14 (a) 颗粒内部不同位置温度历史 (b) 颗粒内部在不同撞击速度下温度历史 (c) 颗粒表面在不同撞击速度下的温度历史

观结构变化。③在压实过程中颗粒表面的加热速率可达到 $10^{10}—10^{12}$ ，颗粒内部温度分布梯度很大，冷却速率也很高，这些都反映了动态压实的巨大优越性。上述这些结果表明微观结构数值模拟是成功的。

在此基础上 J.E.Flinn 和 R.L.Williamson 等人^[42]用同一个模型对轻气炮撞击压实试验进行了系统的宏观效应和微观结构的数值模拟。模拟是对两种不同的 304 不锈钢粉末进行的。计算得到了以下新的结论：①撞击速度越高，粉末压实效果越好，大约在 0.6km/s 撞击速度时，粉末可以完全压实，密度达到 99% 以上。②颗粒之间的空隙闭合时会形成热点，温度达到最大值；而且，随着撞击速度提高，出现温升提高，液化区扩大。把这些计算结果和轻气炮撞击实验结果比较后得出，两者完全一致，因而，证实了计算模型的可靠性。于是，R. L. Williamson 等人进一步用数值模拟来研究爆炸压实中各参数的影响。他们先后

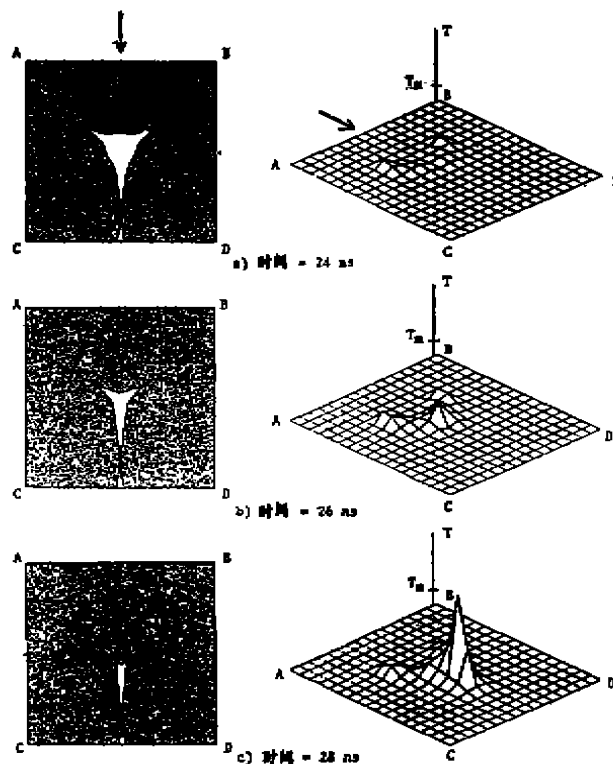


图 15 颗粒间变形和温度关系

对不同粉末材料(不锈钢, 铝, 陶瓷复合材料), 不同应力波幅值, 颗粒尺度和充填气体效应作了计算^[45,46], 得到了一些实验无法得到的结果: 颗粒间的孔隙度对压实起着重要作用, 孔隙越大, 颗粒表面能量沉积越大, 孔隙数越多, 形成热点越多; 颗粒尺度越大能量沉积反而减少; 充填气体对压实影响不重要等。这些结果不仅补充了实验不足, 同时也为实验研究提供了理论指导。

最后值得指出, 由于目前粉末材料状态方程不够完善, 计算局限于 2 维问题以及实验过程十分短暂 (ns), 颗粒尺度十分微小 (μm), 精确地测量应力波历史、温度历史目前几乎是不可能, 因此无法对数值模拟结果作定量的比较, 计算精度只能是定性的。今后, 进一步加强对上述这些不足之处进行研究是十分必要的。

4 国内在粉末材料爆炸压实数值模拟方面的研究概况

我国对粉末爆炸压实研究在 80 年代已全面展开, 但只是在实验研究方面和国外情况类似, 它的数值模拟工作一直未引起重视, 直到 90 年代才刚刚开始, 比国外落后了 10 年左右。然而, 应该看到我们对流体弹塑性体运动的数值模拟工作开展是很早的, 早在 60 年代国内各有关单位都已开始这方面研究工作, 对许多大型编码, 例如 HEMP, HELP, EPIC, DYNA 和 SOIL 等都已进行了开发、研究和改造。有些单位自行编制了不少欧拉型或拉格朗日型的程序, 并在爆炸和冲击动力学的有关领域, 例如核爆炸效应, 超高速碰撞, 聚能射流破甲和工程爆破等, 得到了富有成效的应用^[47], 因此, 应该看到国内在这方面基础是好的, 力量是雄厚的, 完全可望在近期内在粉末爆炸压实数值模拟工作方面赶上国际水平。

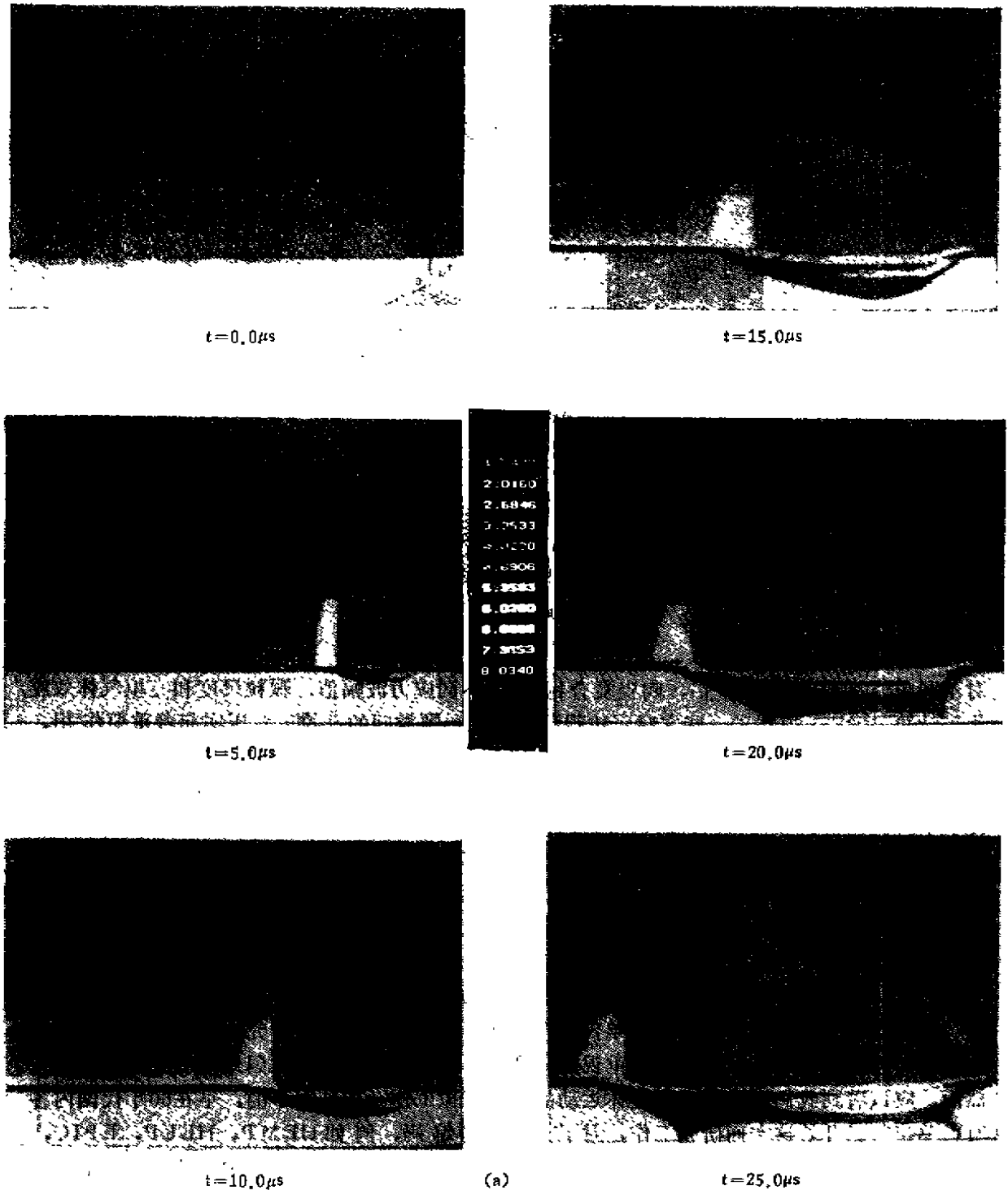


图16 (a) 60%理论密度铜粉爆炸压实密度分布

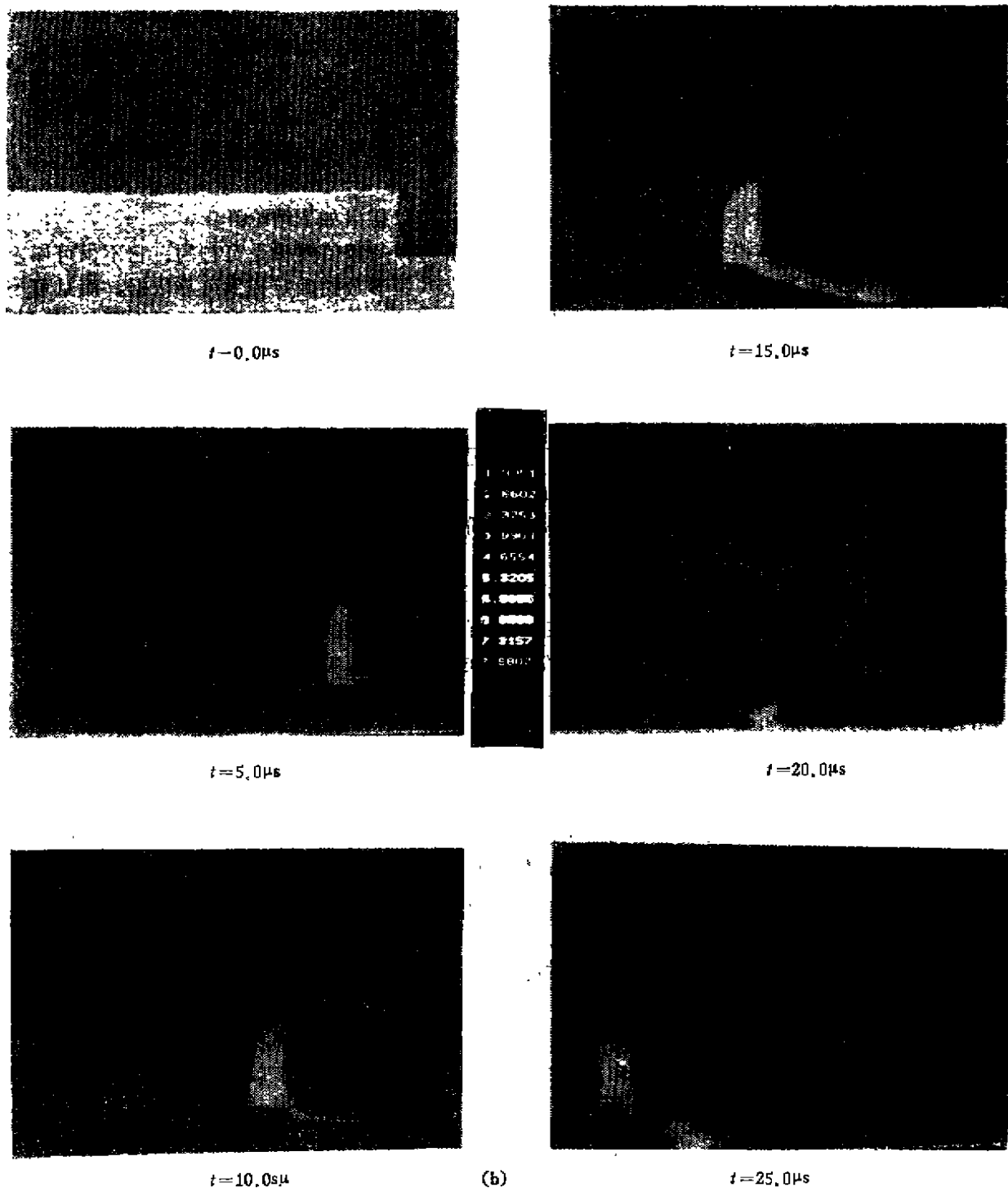


图 16 (b) 60%理论密度铜粉爆炸压实压力分布

近年来,我们在完成 863 高技术项目中,对 W. E. Johnson 的 SOIL 程序编码进行了开发和改造,完成了 60% 理论密度的铜粉滑移爆轰压实的宏观效应数值模拟工作,计算结果见图 16^[40]。计算结果表明,在轴芯附近会出现明显的马赫反射现象,从而形成马赫孔,使已压实的粉末又重新离散,这样会严重影响到固结体的质量。计算也指出,如果改变炸药和粉末的配比,改进实验方案,完全可以避免出现马赫孔。这些结果已被我们的实验所证实。

5 结 论

通过对粉末材料爆炸压实数值模拟的动态分析,可以得出如下结论:

①用流体弹塑性体模型来进行粉末材料爆炸压实过程的数值模拟是可行的。它不仅模拟爆炸压实的宏观过程,为实验装置的设计和最佳实验参数的确定提供可靠依据,而且可以模拟爆炸压实的微观过程,特别是模拟爆炸压实时颗粒间的相互作用以及能量在颗粒表面沉积的机理。这为进一步开展粉末材料爆炸压实机理的研究和应用奠定了基础。

②从数值模拟的观点来看,有欧拉法和拉格朗日法两种方法可供选择。但是对于粉末材料爆炸压实来说,由于实验装置比较复杂,一般都包含 3 种以上材料,这对界面处理带来一定的复杂性。从国外研究动态来看,比较多的情况是采用欧拉方法。虽然,欧拉方法在处理界面时精度不高,但从实际效果看,它还是一种简单实用的方法,基本上满足了实际需要。因此,我们选用欧拉型 SOIL 编码来数值模拟铜粉爆炸压实宏观效应。结果表明,数值模拟是成功的。

③从国内外研究动态来看,国内在粉末爆炸压实数值模拟方面刚刚起步,比国外落后 10 年左右。但是,我们认为在近期完全可以赶上国际水平。问题的关键是在发展数值模拟技术的同时,必须抓紧对粉末状态方程和弹塑性本构关系的研究,特别对颗粒间相互作用和热分析研究。此外,应该更加关注对粉末爆炸压实过程中压力、温度等力学量的测量工作,数值模拟的结果需要用这些实测结果来进行检验。

关于粉末爆炸压实数值模拟工作有以下几个发展方向是值得注意:

①建立高精度格式。从 80 年代以来,国外已有人在这方面作了努力,并取得了重大进展。目前国内所掌握的编码基本上仍是 1 阶精度。但是必须注意其差分格式和物理模型的精度要匹配,计算区域内点格式和边界点格式精度要匹配。

② 3 维问题数值模拟。国外许多爆炸力学问题的数值模拟已完成了 3 维计算,唯有粉末爆炸压实的数值模拟仅仅完成了 2 维计算。因此实现粉末爆炸压实 3 维计算是一个必然的发展趋势,特别是对微观结构的 3 维数值模拟。然而从目前国内计算条件来看,完成 3 维计算还有相当长的路程要走。

③加强粉末爆炸压实数值模拟的 CAD 化,为在实际应用中发挥积极作用而努力。这方面的工作主要是建立完美的前处理和后处理程序包,大型通用程序,以及数据库、图形输出技术软件。

参 考 文 献

- 1 程天一, 李守华. 快速凝固粉末与新型合金, 宇航出版社, 北京, 1990
- 2 Gourdin W H, Dynamic consolidation of metal powder. *Prog in Mater. Sci.*, 30 (1986): 39-80
- 3 Prummer R. 粉末材料爆炸压实(中译本)(1989)
- 4 Kimura Y, Forming of Zinc ferrite by explosive compression, *Japan J. Appl. Phys.*, 2 (1963); 312

- 5 Duvall G E, Graham R A. Phase transitions under shock wave loading. *Rev Modern Phys.*, **49**, 3 (1977) : 523—579
- 6 郑哲敏. 流体弹塑性体. 中国大百科全书·力学卷. 中国大百科全书出版社, 北京 (1985) : 343
- 7 郑哲敏. 装甲过程逐步分析及一些基本知识. 力学情报 (现代力学进展), **3**, 5 (1973): 36—74; **3**, 6(1973): 67—98
- 8 Wilkins M L. Calculation of elastic-plastic flow. in *Method of Computational physics* (ed Alder B, et al) . Academic Press, New York, Vol. 3 (1964)
- 9 Maenohar G, Sack S. The tensor code. in *Method of Computational Physics* (ed Alder B, et al) . Academic Press, New York, Vol. 3 (1964) : 184—210
- 10 Cherry J T, et al. Two dimensional stress-induced adiabatic flow. UCRL-50987 (1970)
- 11 Wislow AM. Equipotential zoning of two dimensional meshes, UCRL-7321 (1963)
- 12 Johnson W E. OIL Code, a continuous two-dimensional Eulerian hydrodynamic code, GAMD-5580 (1965)
- 13 —. Private communication (1987)
- 14 Yanenko N N. *The Method of Fractional Steps* (English Tr, ed Holt M) . Berlin, Springer (1971)
- 15 Harlow F H, et al. The MAC method, LA-3425 (1966)
- 16 Wilkins M L. Calculation of elastic-plastic flow. UCRL-7322. Rev. 1 (1967) ; Rev. 2 (1982)
- 17 Swegle J W, Toody W—A computer program for two dimensional wave propagation, SAND-78-6552 (1978)
- 18 —. ARTOO—An automatically rezoning two dimensional Lagrangian finite difference wavecode. SAND-81-2235 (1981)
- 19 Johnson G R. Dynamic response of Axisymmetric solid subjected to impact and spin. *AIAA J*, **17**, 9 (1979) : 915-919
- 20 Pyun J J. A new slideline/eroding algorithm for EPIC2, *Int. J. Impact Eng.*, **10** (1990): 473—482
- 21 Hallquist J O. User's manual for DYNA2D—An explicit two dimensional hydrodynamic finite element code with interactive rezoning and graphical display. UCID-18756, Rev. 3 (1988)
- 22 Hageman L J, et al. HELP. A multimaterial Eulerian program for compressible fluid and elastic-plastic flow in two space dimensions and time. AD-726459 (1972)
- 23 Amsden A A. PIC method in compressible fluid dynamics, LA-3466 (1966)
- 24 Thompson S L. CSQ: A two dimensional hydrodynamic program with energy flow and material strength, SAND-74-0122 (1974)
- 25 McGlaun J M. Improvements in CSQ II: An improved numerical convection Algorithm. SAND-82-0051 (1982)
- 26 Thompson S L, McGlaun J M. CSQ III—An Eulerian finite difference program for two-dimensional material response: User's manual, SAND-87-2763 (1988)
- 27 McGlaun J M, Thompson S L. CTH: A three dimensional large deformation shock wave physics code. *Int. J. Impact Eng.*, **10** (1990) : 351—360
- 28 Addressio F L, et al. CAVEAT: A computer code for fluid dynamics problems with large distortion and external slip. LA-10613-MS (1986)
- 29 Youngs D L. Time-dependent multi-material flow with large flow distortion. in *Numerical Method for Fluid Dynamics* (ed Morton K W, Baines M J). Academic Press, New York (1982) : 273—285
- 30 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme IV, a new approach to numerical convection. *J comput. phys.*, **23** (1977) : 276—299
- 31 Dukowicz J K. A general, non-iterative Riemann solver for Godunov's method. *J. Comput. Phys.*, **61**, 1 (1985) : 119—137
- 32 Durrett R E, Matuska D A. The HULL Code, finite difference solution to the equations of continuum mechanics. AFATL-TR-78-125 (1978)
- 33 Matuska D A. SAIL user's guide for running HULL and EPIC3 codes. AFATL-TR-81-70 (1980)
- 34 Cagliostro D J, Mandell D A, Schwabbe L A. MESA 3-D calculations of Armor penetration by projectiles with combined obliquity and yaw. *Int. J. Impact Eng.*, **10** (1990) : 81—92
- 35 Wilkins M L, et al. Computer simulation of dynamic compaction, UCRL-88031 (1982)
- 36 —. Explosive consolidation of Aluminum Nitre powder, in *Metallurgical Applications of Shock Waves and High-strain-rate Phenomena* (ed Murr L E, et al) (1986) : 57—82
- 37 Berry R A, Williamson R L. Numerical modeling of the experimental dynamic consolidated metal powder, in *Metallurgical Application of Shock Waves and High-strain-rate Phenomena* (ed Murr L

- 7, et al) (1986) : 167—187
- 38 Reaugh J E. Computer simulations to study the explosive consolidation of powders into rods, *J. Appl. Phys.*, **61**, 3 (1987) : 902—908
- 39 ———. Computer simulation of the explosive consolidation of powders, in *Shock Waves in Condensed Matter* (1987) : 391—395
- 40 Mann A P. Numerical modeling of dynamic powder compaction using the kawakita equation of state, *J. Appl. Phys.*, **70**, 6 (1991) : 3281—3290
- 41 Williamson R A, Berry R A. Microlevel numerical modeling of the shock wave induced consolidation of metal powder, in *Shock Wave in Condensed Matter* (1987) : 341—346
- 42 Flinn J F, Williamson R L. Dynamic consolidation of type 304 stainless powders in gas gun experiments, *J. Appl. Phys.*, **64**, 3 (1988) : 1446—1456
- 43 Williamson R L et al, Numerical simulation of dynamic consolidation of a SiC fiber-reinforced aluminum composite, *ibid.*, **66**, 4 (1990) : 1826—1831
- 44 ———. Parametric studies of dynamic powder consolidation using a particle-level numerical model, *J. Appl. Phys.*, **68**, 3 (1990) 1287
- 45 谈庆明, 张德良. 流体弹塑性体运动数值模拟. 北京计算流体力学讨论会文集 (第二辑) (1990) : 6—21
- 46 张德良, 王晓林. 铜粉爆炸压实数值模拟. 863高技术项目1992年进展报告 (1993)

NUMERICAL SIMULATION OF EXPLOSIVE COMPACTION OF POWDER

Zhang De-Liang

Institute of Mechanics, Chinese Academy of sciences

Abstract The numerical simulation of explosive compaction of powder has been systematically reviewed in this paper. The model equations and computational methods of the motion of Hydro-Elasto-plastic body are described together with some typical computer codes. Recent progresses on the numerical simulation of powder explosive compaction are summarized. Finally some suggestions for future development trend are put forward.

Keywords *powder explosive compaction; numerical simulation; Hydro-elasto-plastic body; Lagrangian method; Eulerian method; Coupled method*