

基于格点-弹簧模型模拟含缺陷陶瓷材料的压缩破坏过程

吕文银¹, 张青艳², 周风华^{1*}

(1. 宁波大学 冲击与安全工程教育部重点实验室, 浙江 宁波 315211; 2. 嘉兴南洋职业技术学院, 浙江 嘉兴 314000)

摘要: 采用基于有限元参数映射的格点-弹簧模型(lattice spring model)对多晶三氧化二铝(Al_2O_3)陶瓷的压缩破坏过程进行了数值模拟. 采用弹脆性模型模拟材料, 用弱界面模拟材料晶界, 基于Griffith能量准则判断断裂. 模拟了特定孔隙率下的 Al_2O_3 陶瓷的冲击破坏过程, 得到压缩强度与实验测试结果基本吻合. 考察了孔隙对材料压缩力学性能的影响, 结果显示: 有孔隙陶瓷表现出一定的应变率敏感性并且其裂纹密度时程曲线具有明显的“台阶”, 而无孔隙陶瓷没有此现象; 含孔隙陶瓷的裂纹密度发展过程中的“台阶”对应了内部裂纹的发展和止裂机制, 是有孔隙陶瓷和无孔隙陶瓷的重要区别.

关键词: 陶瓷; 多孔性; 压缩破坏; 格点-弹簧模型; 应变率

中图分类号: O347.3

文献标志码: A

文章编号: 1001-5132 (2017) 05-0076-07

陶瓷材料在生产生活中有着广泛的应用^[1], 三氧化二铝(Al_2O_3)、碳化硅(SiC)陶瓷被用于防护装置的制造^[2]. 陶瓷的力学性能被人们所关注, 已有一些关于陶瓷层裂强度的研究^[3-4], 周风华等^[5-6]对 Al_2O_3 陶瓷做了准静态和动态压缩实验, 观察到受压陶瓷“爆炸”式破碎的现象, 并对其破坏过程进行了理论分析. 然而用实验方法研究陶瓷的压缩破坏通常不能观察到所有可能的细节, 有必要进行数值模拟研究. 文献[7-8]用内聚力单元对陶瓷材料在拉伸载荷下的破坏进行了有限元模拟, Kraft等^[9]利用内聚力单元模拟了陶瓷在受压状态下沿晶界断裂和破碎, 但采用内聚力单元方法模拟压缩破坏会遇到计算量骤增的困难.

为克服有限元方法的困难, 可选择离散元方法来模拟陶瓷的压缩破坏. 格点-弹簧模型是离散元法的一种, 根据单元之间相互作用模型的不同, 存在多种变体^[10-13]. 本论文采用基于有限元参数映射的格点-弹簧模型, 该方法由Gusev在2004年提出^[14], 能保证在弹性变形阶段计算结果和有限元模型一致. 喻寅等^[15-16]基于此模型编写了

Fortran程序(二维), 研究了PZT陶瓷在承受冲击波加载时的破坏机理, 对预设的杨氏模量和剪切模量进行了验证, 程序的可靠性良好. 本论文在喻寅等的程序基础上插入有限元代码, 对中高应变率条件下 Al_2O_3 陶瓷的压缩破坏过程进行了数值模拟研究.

1 建模

1.1 参数映射

首先建立起一个格点-弹簧模型和有限元模型共用的正三角形网格, 计算得到有限元模型的总刚度矩阵(奇异矩阵), 再借助共用的模型网格, 换算出格点-弹簧模型中的相互作用参数(弹簧刚度系数). 如图1(a)所示, 格点(也称颗粒)为有限元中的节点, 任意两个相邻的格点 i, j 之间都有一对“弹簧”, 即法向弹簧和切向弹簧, 使相邻格点之间产生法向和切向作用力. 在 i, j 之间建立局部坐标系, 原点为 j , n 轴由 j 指向 i . 则格点 j 对 i 的法向和切向作用力 f_{ij}^n 、 f_{ij}^t , 与 i 相对于 j 的法向与切向位移 δ_{ij}^n 、 δ_{ij}^t 相关, 表达为:

收稿日期: 2017-04-21.

宁波大学学报(理工版)网址: <http://journal.lg.nbu.edu.cn/>

基金项目: 国家自然科学基金(11272163, 11390361); 浙江省重点科技创新团队(2013TD21).

第一作者: 吕文银(1989-), 男, 湖北襄阳人, 在读硕士研究生, 主要研究方向: 冲击动力学. E-mail: lvwenyin1012@163.com

*通信作者: 周风华(1964-), 男, 浙江宁波人, 教授, 主要研究方向: 冲击动力学. E-mail: zhoulfenghua@nbu.edu.cn

$$\begin{Bmatrix} f_{ij}^n \\ f_{ij}^r \end{Bmatrix} = [k_s] \begin{Bmatrix} \delta_{ij}^n \\ \delta_{ij}^r \end{Bmatrix}, \quad (1)$$

其中 $[k_s]$ 为局域坐标系中的弹簧刚度系数矩阵, 根据有限元的总刚度矩阵进行定量映射得到, 具体映射关系参看文献[15]. i 对 j 的力与(1)式中的力大小相等、方向相反. 颗粒具有转动自由度, 其直径为三角形边长; 对于正三角形网格, 一个颗粒最多通过 6 对弹簧与 6 个邻近颗粒发生相互作用, 如图 1(a)所示.

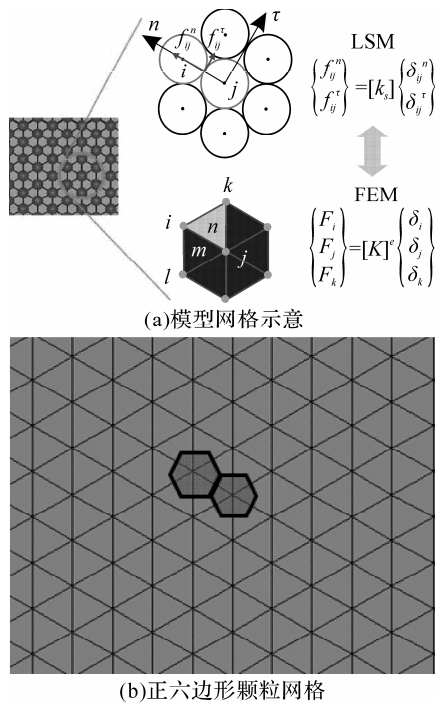


图1 格点-弹簧模型和有限元共用的模型网格示意^[15]和正六边形颗粒网格

1.2 积分算法

积分算法采用离散元中常用的 Verlet 算法中的一种——Beeman 积分算法:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{4f(t) - f(t - \Delta t)}{6m} \Delta t^2, \quad (2)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{2f(t + \Delta t) + 5f(t - \Delta t)}{6m} \Delta t, \quad (3)$$

其中 $f(t)$ 为 t 时刻颗粒所受合力; m 为颗粒质量, 等于有限元节点集中质量; r 和 v 为颗粒的位置和速度.

1.3 断裂准则

基于 Griffith 能量平衡原理判断断裂: 一旦格

点-弹簧模型中的弹簧变形能超过裂纹扩展所消耗的能量, 则判断弹簧失效, 即:

$$E_s > R_0 c, \quad (4)$$

这里 E_s 为两相邻颗粒之间的一对弹簧所存储的拉伸应变能与剪切应变能之和, 这里不计入受压弹簧的应变能, 因为材料在纯粹的压应力下不产生裂纹; R_0 为材料表面能, 由材料的断裂韧性 K_{IC} 换算得到:

$$R_0 = K_{IC}^2 / E, \quad (5)$$

其中 E 为杨氏模量; c 为特征裂纹长度, 将颗粒看作正六边形紧密排列, 则 c 为六边形的边长(图 1(b)). 当(4)式满足时, 这一对颗粒之间的弹簧断开, 此后两颗粒之间就失去了弹簧的相互作用, 但还可以承受接触压力和滑动摩擦力.

1.4 加载条件

图 2(a)描绘了 Al_2O_3 的模型: 长 $300 \mu m$, 宽 $175 \mu m$ 的材料模型处于两片刚性薄板之间, 右端薄板固定不动, 左端薄板向右运动, 通过控制左端薄板的速度可以实现不同的应变率; 在模型中设置狭缝和圆孔两种孔隙: 圆孔平均直径为 $3.6 \mu m$, 狭缝平均长度为 $5 \mu m$, 宽度为 $0.6 \mu m$, 总孔隙度为 4.23%; 模型的孔隙随机分布, 在相同孔隙率下一共做了多个计算模型, 对每个模型进行数值模拟实验, 以排除网格随机性误差. 计算模型中还划分

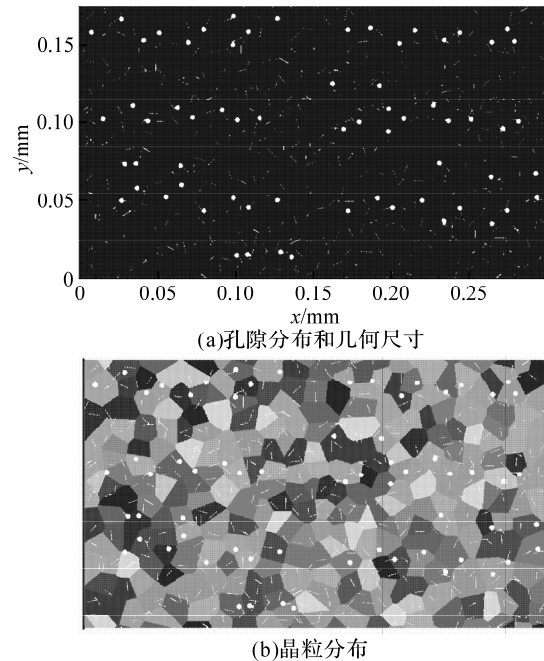


图2 计算模型的孔隙分布和几何尺寸和晶粒分布

不同区域,以模拟晶粒效应,晶粒平均半径为 $8\text{ }\mu\text{m}$,晶粒分布如图 2(b)所示,不同的色块代表不同的晶粒,晶界作为弱界面,在晶界处(4)式中的表面能有所减小^[17].

为与实验结果对比,杨氏模量、表面能、泊松比、密度以及应变率均参考 4.23%孔隙度的 Al_2O_3 圆柱试件的压缩破坏实验数据^[6],如表 1 所示:

表 1 Al_2O_3 陶瓷柱压缩破坏实验数据

E/GPa	$R_0/(\text{J}\cdot\text{m}^{-2})$	ν	$\rho/(\text{kg}\cdot\text{m}^{-3})$	$\dot{\varepsilon}/\text{s}^{-1}$
409	229	0.25	3 910	700~2 000

2 多孔陶瓷的冲击破坏强度与实验对比

在加载应变率 700 s^{-1} 下,计算所得到的两个典型的应力—应变曲线如图 3(a)所示(本文中,压应力为正、拉应力为负).为节约计算成本,前期的弹性变形阶段由有限元模型计算完成(细虚线),接近破坏时刻采用格点—弹簧模型进行数值模拟,获得破坏过程、以及破坏后期的结果(实线和点画线).多孔陶瓷在完全破坏前,应力—应变曲线有可能出现短暂应力陡降,这种现象归因于其多孔结构造成的局部裂纹扩展及止裂.

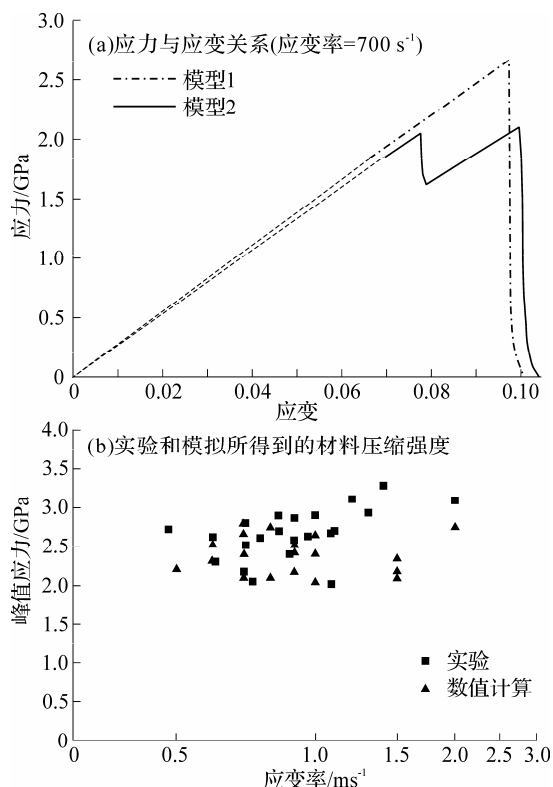


图 3 应力—应变曲线和材料压缩强度

数值模拟得到的最大压力即为材料的压缩强度,采用不同计算模型,在不同应变率下进行数值实验,得到压缩强度,其结果以及与采用 Hopkinson 压杆实验所得到的强度的对比如图 3(b)所示.在 $500\sim 2\,500\text{ s}^{-1}$ 应变率下,模拟与实验数据的平均强度分别为 2.42 和 2.66 GPa,两者基本吻合.

3 陶瓷的破坏过程分析

陶瓷材料的压缩破坏过程依赖于其内部缺陷,为分析材料在压缩过程中裂纹的萌生和演化过程,以及缺陷对材料压缩破坏的影响,我们模拟了孔隙率为 0.00%、1.00%、2.00%和 4.23%材料的压缩破坏过程.

3.1 有孔隙陶瓷破坏过程

数值模拟给出了多孔陶瓷材料在压缩破坏过程中的内部裂纹扩展和演化规律.设破坏前模型的弹簧总个数为 n ,破坏过程中已经断开的弹簧总数为 m ,则裂纹密度定义为:

$$D_{\text{crack}} = \frac{m}{n}.$$

图 4 给出一次典型加载过程(应变率为 $5\,000\text{ s}^{-1}$,孔隙率 2.00%)中,裂纹密度值和压缩应力变化的时程曲线.从模拟结果看,多孔陶瓷在高应变率下的压缩破坏过程可分为如下几个阶段:

1. 无损伤变形;
2. 微裂纹萌生及稳定扩展阶段:在材料局部萌生裂纹,经过短暂的扩展后止裂,使裂纹密度曲线产生“台阶”,即在“台阶”的平台时间内,不产生新的裂纹;
3. 破坏和裂纹失稳扩展:在材料内部多点萌生裂纹并快速扩展,裂纹密度快速上升,此时试件承载能力快速下降;
4. 试件破碎:出现贯穿试件的裂纹,试件失去承载能力,此时裂纹密度不再发生变化.

图 4 中给出的试件加载方向应力 σ_x 的云图(单位:Pa).将阶段 1 与阶段 2 的云图进行对比,可以看到小黑框标记处发生了微小的裂纹扩展止裂,对应于裂纹密度中的阶梯平台段.阶梯的平台时间约为 200 ns,根据相应的应力曲线,在 200 ns 内,应力水平上升了约 0.35 GPa.可以推测,应变率越

高, 在阶梯平台时间内应力上升的幅度相对来说就会大一些, 从而峰值应力升高越多。

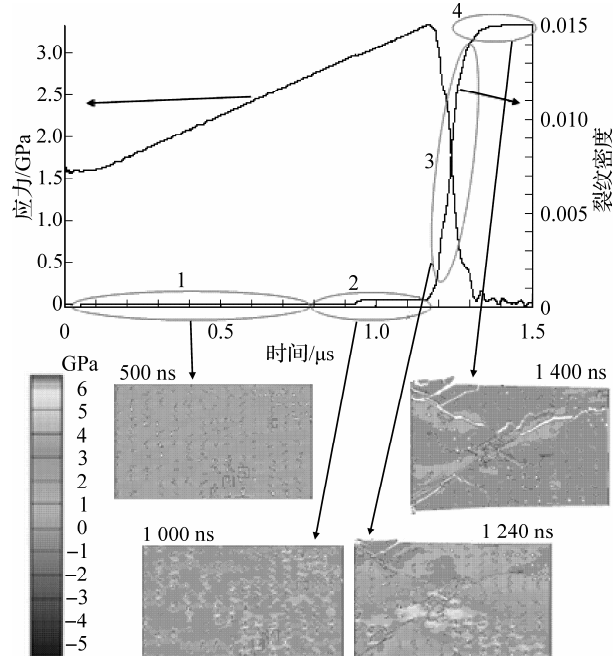


图4 孔隙率2.0%陶瓷的破坏过程: 加载曲线、裂纹增长曲线以及典型时刻的内部破坏形貌

3.2 无孔隙陶瓷破坏过程

无孔隙(孔隙率 0.00%)陶瓷的破坏过程与多孔陶瓷有所不同, 其破坏过程图解如图 5 所示(应变率 5000 s^{-1})。与多孔陶瓷的破坏强度 3.3 GPa 相比, 无孔隙陶瓷的破坏强度明显提高, 接近 8.0 GPa。

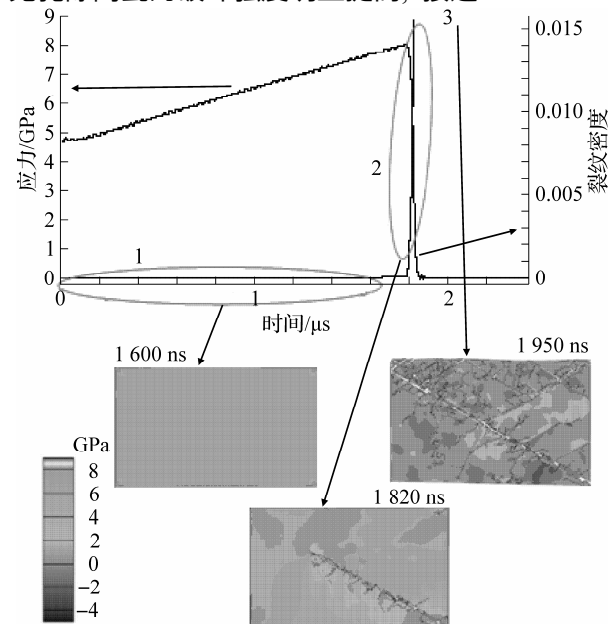


图5 无孔隙陶瓷破坏过程: 加载曲线、裂纹增长曲线以及典型时刻的内部破坏形貌

无孔隙材料在破坏之前, 内部缺少微裂纹的起始和演化过程, 其裂纹密度没有“台阶”。无孔隙陶瓷的破坏过程大致可分为 3 个阶段:

1. 无损伤变形;
2. 微裂纹的产生裂纹及快速失稳扩展;
3. 完全破碎(最终裂纹密度高于 0.015, 曲线在图中未显示出来)。

3.3 多孔陶瓷的两种止裂机制

图 4 给出的含孔隙陶瓷的裂纹密度曲线的“台阶”, 和内部微裂纹的“起裂-止裂”过程相关, 具体分析存在两种止裂机制:

(1) 裂纹扩展导致局部应力松弛

图 6 给出一个多孔陶瓷的裂纹密度的发展曲线, 与“台阶”相对应的微裂纹扩展-止裂过程如四张图所示, 其中轴向压力方向水平。可以看出, 在孔隙周围与加载应力相垂直的 y 方向产生了局部拉应力, 导致微裂纹的萌生和扩展, 微裂纹扩展后将局部拉伸应力释放, 从而使裂纹止裂。

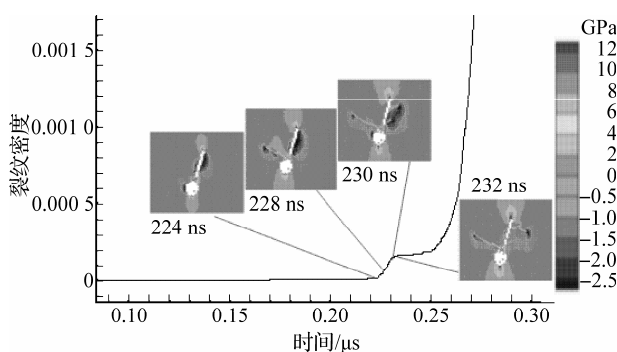


图6 裂纹扩展导致局部应力松弛和止裂

(2) 沿晶裂纹在晶界突然转向处止裂

裂纹尖端附近线性弹性场的数学分析表明, 当裂纹发生一定角度的偏转时应力强度因子(或机械能释放率)会有所下降^[17], 当偏转角为 0 时, 机械能释放率最大, 偏转角越大则机械能释放率越小, 这就相当于裂纹偏离原来的路径时扩展阻力会增大。我们在模拟试验中观察到了这种因裂纹偏转而发生止裂的现象, 止裂过程如图 7 所示。图中不同的色块代表着不同的晶粒, 晶粒中存在着初始缺陷即狭缝(白色)。在 1155 ns 狭缝附近产生了一小段沿晶界扩展的裂纹, 在 1155 ns 与 1460 ns 之间裂纹没有进一步扩展, 直到 1510 ns 试件发生破碎时才发生失稳扩展。

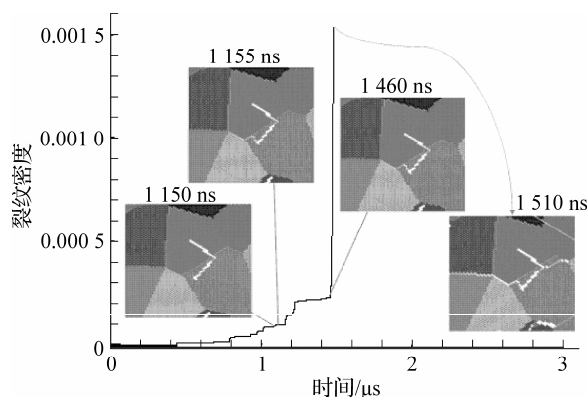


图7 裂纹在晶界上的停滞

4 影响陶瓷破坏过程和强度的物理参数

4.1 孔隙度和应变率影响

我们分别模拟了不同应变率下多孔陶瓷与无孔隙陶瓷的压缩破坏,其中多孔陶瓷的孔隙度分为1.00%、2.00%和4.23%三组。图8(a)展示了孔隙度为1.00%的陶瓷在不同应变率下的应力—应变曲线。在 $50 \sim 50\,000 \text{ s}^{-1}$ 的应变率范围内峰值应力逐渐上升;而在 $500\,000 \text{ s}^{-1}$ 的超高应变率下,由于材料模型未达到均匀受力状态即发生局部破坏,其内部平均应力的强度有所下降。

孔隙分布以及晶粒分布的随机性导致材料强度呈现一定的离散性,对给定孔隙度的材料做不同模型,在给定应变率下对不同模型进行模拟,得到平均强度。材料的平均强度与应变率之间的关系曲线如图8(b)所示。如前所述,材料的孔隙度显著影响其强度,孔隙度越高强度越低。此外:无孔隙陶瓷的峰值应力表现出了“负”的率敏感性,有孔隙陶瓷表现为正的率敏感性。其原因为:(1)无孔隙陶瓷内部没有缺陷,本身能够承受很高的压力,一旦发生格子键断裂就会导致材料破坏。一般而言,无孔隙材料不存在应变率效应,但是在极高应变率下,由于试件在达到平衡状态前会出现局部破坏,平均应力降低,导致表现的“负”率敏感性;(2)有孔隙材料在低应力水平下孔隙周围出现了裂纹,部分裂纹在经过短暂的扩展后可能会停止,待应力继续升高后才出现失稳扩展,因此有孔隙材料的整体破坏涉及裂纹从产生到贯穿整个试件的时间过程。在高应变率加载下试件内部的裂纹扩展来不及贯穿试件,从而表现出承载压力(即压缩

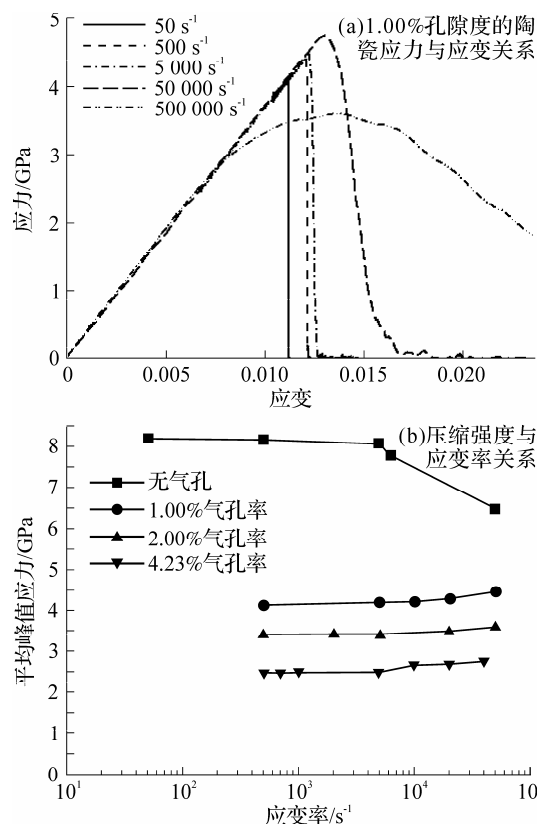


图8 陶瓷在不同应变率下的应力—应变及不同孔隙率材料的压缩强度与应变率关系

强度)升高的“正”率敏感性。

4.2 晶界的影响

在图2(b)所示的晶粒模型中,每个晶粒都被随机赋予了一个 $0 \sim 180^\circ$ 之间的晶粒取向角 ϕ ,因此每个晶界都有一个取向角差 $\Delta\phi$ 。通常认为晶界结合能弱于晶粒内部材料,我们在计算中将晶界处的格子键的断裂能 R_{GBmin} 降低,其随晶界取向角之差 $\Delta\phi$ 的变化如图9所示, $\Delta\phi$ 在 $0 \sim 10^\circ$ 时

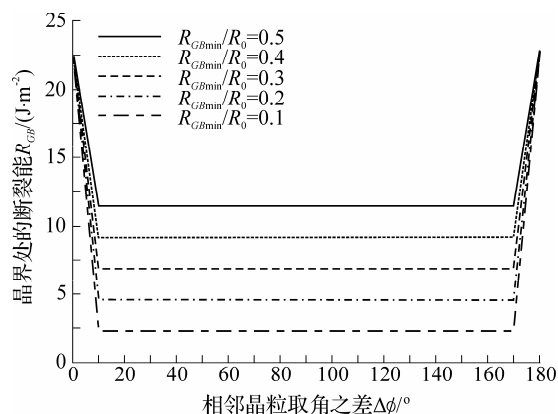


图9 晶界处的断裂能随取向角之差的变化关系

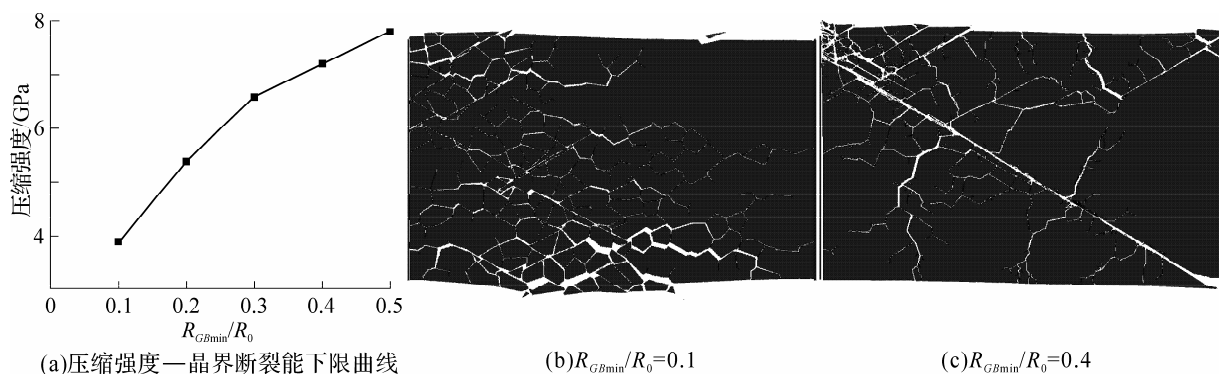


图10 压缩强度随晶界断裂能下限的变化及弱晶界和强晶界的破坏模式

R_{GBmin} 从 R_0 线性下降到弱化平台, 断裂能的最大弱化程度由参数 R_{GBmin}/R_0 决定。图9的晶界断裂能随取向角度的变化关系基于文献[17]中关于氯化钾(KCl)离子晶体(Al_2O_3 也为离子晶体)的实验测量数据。设孔隙度为0(无孔隙材料), 改变晶界断裂能的下限 R_{GBmin} 以考察晶界强弱对材料压缩强度的影响。

4.3 对压缩强度的影响

我们分别对 $R_{GBmin}/R_0 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$ 的模型进行了计算(孔隙度为0, 应变率 $5000 s^{-1}$), 得到压缩强度如图10所示, 可见压缩强度随晶界断裂能下限的提高而逐渐升高。对比图10与图9, R_{GBmin}/R_0 的值从0.5降到0.1过程中, 材料的压缩强度均高于相同应变率下的多孔材料, 这是因为孔隙会造成应力集中产生裂纹, 而本节的计算模型不含孔隙, 即使晶界断裂能下限降为本征断裂能的0.1倍, 压缩强度也接近4 GPa。

4.4 对破坏模式的影响

晶界强弱的变化对材料的压缩破坏模式产生影响。图10(b)、10(c)分别展示了 $R_{GBmin}/R_0 = 0.1$ (弱晶界)、0.4(强晶界)的材料破坏时形貌。可见当晶界较弱时, 沿晶裂纹会相互联通, 最终形成沿加载方向贯穿试件的裂纹簇; 而当晶界较强时, 则会形成一道剪切穿晶裂纹贯穿试件。

5 结论

用基于有限元参数映射的格点-弹簧模型模拟含孔隙陶瓷材料在不同应变率下的压缩破坏过程, 获得如下结果:

孔隙度为4.23%的多孔陶瓷材料的模拟压缩强度与实验结果基本吻合;

陶瓷中孔隙的存在降低了陶瓷的压缩强度, 也提高了陶瓷的率敏感性;

含孔隙陶瓷在压缩破坏过程中, 孔隙周边的微裂纹起裂之后可能由于局部应力松弛、或者由于晶界偏转而发生止裂; 微裂纹的“起裂-止裂”过程是多孔陶瓷表现出率敏感性的主要机制;

弱化的晶界类似于一种内部缺陷, 会降低材料的压缩强度, 也会改变破坏模式。

数值模拟揭示的陶瓷材料微观断裂现象补充了实验结果, 为深入研究脆性材料在冲击压缩载荷作用下的动态破碎过程提供了支持。

参考文献:

- [1] GREEN D J. 陶瓷材料力学性能导论[M]. 北京: 清华大学出版社, 2003:1-2.
- [2] VIECHNICKI D J, SIAVIN M J, KLIMAN M I. Development and current status of armor ceramics[J]. American Ceramic Society Bulletin, 1991, 70:1035-1039.
- [3] 肖桂凤, 唐志平, 周昌国, 等. 氮化硅陶瓷层裂强度的研究[J]. 高压物理学报, 2005, 19(3):219-224.
- [4] DÍAZ-RUBIO F G, PÉREZ J R, GÁLVEZ V S. The spalling of long bars as a reliable method of measuring the dynamic tensile strength of ceramics[J]. International Journal of Impact Engineering, 2002, 27(2):161-177.
- [5] ZHOU F, WANG Y. Failure and fragmentation of alumina cylinders under compressive loading[C]// DYMAT 2009-9th International Conference on the Mechanical and Physical Behaviour of Materials Under Dynamic Loading, Brussels, Belgium, 2009:1311-1316.
- [6] 张青艳, 靳晓庆, 周风华. Al_2O_3 陶瓷柱在准静态压缩下的破坏和动态碎裂过程[C]// 西安: 第十一届全国冲击动力学学术会议, 2013.
- [7] KRAFT R H, MOLINARI J F. A statistical investigation of the effects of grain boundary properties on transgranular

- fracture[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(17):4739-4749.
- [8] ZHOU F, MOLINARI J F. Stochastic fracture of ceramics under dynamic tensile loading[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2004, 41(22/23):6573-6596.
- [9] KRAFT R H, MOLINARI J F, RAMESH K T, et al. Computational micromechanics of dynamic compressive loading of a brittle polycrystalline material using a distribution of grain boundary properties[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(8):2618-2641.
- [10] KARWOWSKI J, SZEWC K. Separable N-particle Hookean models[EB/OL]. [2017-01-15]. <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/213/1/012016>.
- [11] OSTOJA-STARZEWICZ M. Lattice models in micro-mechanics[J]. *Applied Mechanics Reviews*, 2002, 55(1): 35-60.
- [12] YAN H, LI G, SANDER L M. Fracture growth in 2d elastic networks with Born model[J]. *Europhysics Letters*, 1989, 10(1):7-13.
- [13] GRAH M, ALZEBDEH K, SHENG P Y, et al. Brittle intergranular failure in 2D microstructures: Experiments and computer simulations[J]. *Acta Materialia*, 1996, 44(10):4003-4018.
- [14] GUSEV A A. Finite element mapping for spring network representations of the mechanics of solids[EB/OL]. [2016-09-10]. <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.93.034302>.
- [15] YU Y, WANG W, HE H, et al. Modeling multiscale evolution of numerous voids in shocked brittle material[EB/OL]. [2016-10-21]. <https://journals.aps.org/pre/pdf/10.1103/PhysRevE.89.043309>.
- [16] YU Y, WANG W, HE H, et al. Mesoscopic deformation features of shocked porous ceramic: Polycrystalline modeling and experimental observations[EB/OL]. [2016-11-06]. <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.4916244>.
- [17] LAWN B. 脆性固体断裂力学[M]. 2版. 北京: 高等教育出版社, 2010:150-161.

Lattice-spring model simulations on compressive failure process of ceramics with internal defects

LÜ Wen-yin¹, ZHANG Qing-yan², ZHOU Feng-hua^{1*}

(1. Key Laboratory of Impact and Engineering of Ministry of Education, Ningbo University, Ningbo 315211, China;

2. Jiaxing Nanyang Polytechnic Institute, Jiaxing 314000, China)

Abstract: A lattice spring model based on Gusev's finite element parameter mapping is used to simulate the failure of polycrystalline alumina (Al_2O_3) under compressive loading. An elastic-brittle model is utilized and the fracture criterion is set based on the Griffith's energy principle. Grain boundaries are considered, which will affect crack propagation. Simulations of alumina with certain porosity under impact loading are carried out, showing that the peak compressive stresses, which represent the compressive strengths of the material, are in good agreement with the experimental results. Also investigated is the strain rate sensitivities of porous and non-porous specimens, finding that the porous specimen exhibits strain rate sensitivity while non-porous specimen does not. In addition, the former's crack density history curve shows distinctive "steps". Further analysis shows that there are two crack preventing mechanisms corresponding to these steps, which causes the apparent strain rate effect in porous ceramics.

Key words: ceramics; porosity; compressive failure; lattice-spring model; strain rate effect

(责任编辑 韩超)