

微喷射现象数值模拟研究进展概述

邵建立¹, 何安民², 王 裴²

(1. 北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081;

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

摘要: 对微喷射现象的国内外数值模拟研究进行了简要梳理与总结。首先, 对微喷射现象特征及其物理内涵进行了解读, 然后分别从分子动力学和连续介质力学层次, 概述了微射流和微层裂两种主要物质喷射机制的数值模拟研究进展, 最后归纳了微喷射现象数值模拟研究仍存在的一些难点问题。希望能为微喷射及相关领域的数值模拟与建模研究提供有益参考。

关键词: 微喷射; 冲击; 分子动力学; 连续介质力学

中图分类号: O521.2

文献标识码: A

本文所述的微喷射是指冲击波从金属等材料表面反射时产生的物质喷射。据报道, 这一现象最早由 Walsh 等^[1] 在实验中发现。一般情况下, 喷射物的质量很小, 主要来源于(近)表面微米及亚微米尺度缺陷^[2-4], 因此这种物质喷射常被简称为微喷射。由于其在冲击压缩科学与技术领域中的重要性^[5-6], 微喷射现象自被发现以来便受到国内外研究学者的广泛关注与重视。早期的微喷射研究以实验手段为主^[7-28], 多年来微喷射实验技术已取得长足进展, 发展了 Asay 膜^[2, 14]、压电探针^[15-16]、X 射线成像^[17-18]、全息成像^[19-20]、高速摄影^[21]、质子照相^[22-23]、光子多普勒测速^[24-25] 以及回收^[26-28] 等诸多测试技术。大量实验研究^[9, 11] 表明, 微喷射是一种典型的多机制、多影响因素的复杂动力学现象, 图 1 和图 2 分别给出了喷射物形成机制示意图与实验观测结果。需要说明, 金属表面喷射物质量一般在每平方厘米 100 mg 以内, 喷射颗粒直径大多在 10 μm 以内, 而最大喷射速度可达每秒数公里, 这些现象特征为微喷射的精细测量带来极大困难。如何获得更直接、更精确的喷射数据仍然是当前实验研究领域的热点问题。

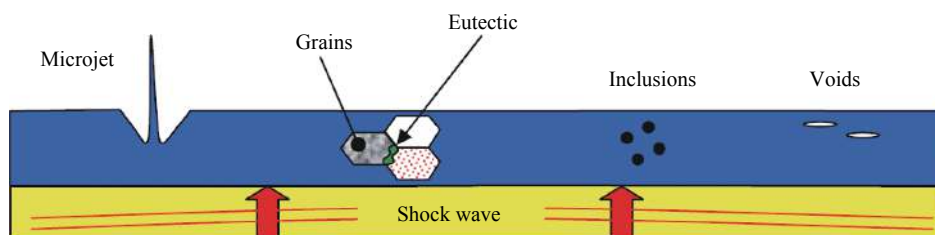


图 1 冲击波作用下可能的喷射物形成机制^[9]

Fig. 1 Illustration of possible ejecta formation mechanisms^[9]

喷射物的产生不仅与表面缺陷相关, 还显著地依赖于冲击压力、波形、材料强度与熔化等因素。随着冲击压力的升高, 微喷射物理机制会发生转变, 微喷射质量相应出现阶段性变化, 如图 3 所示。实

* 收稿日期: 2019-05-28; 修回日期: 2019-05-30

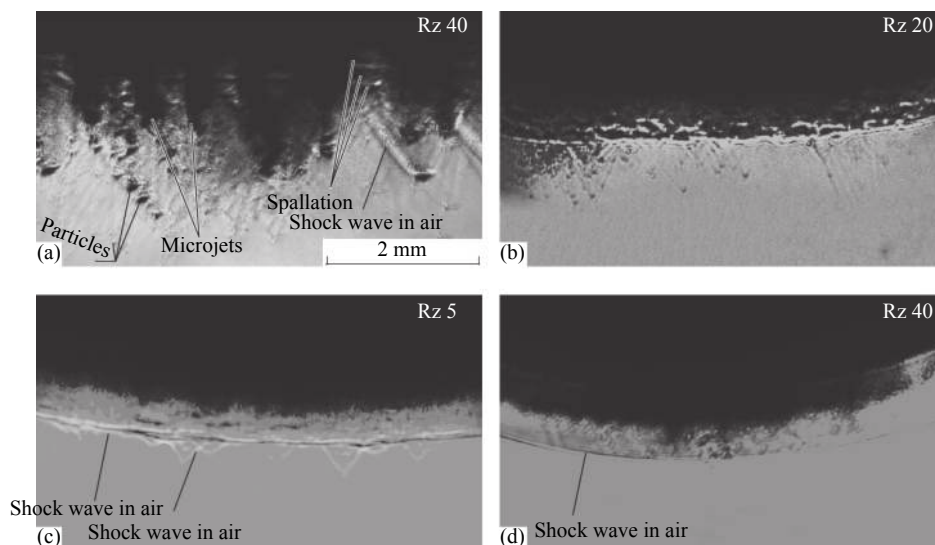
基金项目: 国家自然科学基金委员会-中国工程物理研究院“NSAF”联合基金(U1530216); 科学挑战专题(TZ2016001); 北京理工大学青年教师学术启动计划

作者简介: 邵建立(1979—), 男, 博士, 特别研究员, 主要从事材料动态力学响应理论研究。

E-mail: shao_jianli@bit.edu.cn

通信作者: 王 裴(1975—), 男, 博士, 研究员, 主要从事材料动态力学响应、多介质混合理论研究。

E-mail: wangpei@iapcm.ac.cn

图 2 铅(a、b、c)和钢(d)表面喷射物照片^[10]Fig. 2 Photographs of the ejection of particles from the free surfaces of lead (a, b, c) and steel (d)^[10]

际中,微射流和微层裂是最主要的两种物质喷射机制。前者主要与表面缺陷相关,因聚能效应产生较高速喷射物;后者是指材料近表面的动态拉伸破坏,主要取决于加载波形以及材料是否熔化。对于爆轰或激光等加载方式,冲击波一般为非持续的,此时微射流与微层裂都会发生。总的来说,微喷射过程涵盖了近表面区域的大变形、熔化与损伤断裂等一系列复杂物理问题。

2017 年,Buttler 等^[29]对微喷射现象的研究历史按年代作了简要回顾,指出微喷射物理是一个年轻的研究领域,但近年来已取得巨大进步,喷射物产生的物理机制至今已完全探明。最近,王裴等^[30]总结了其课题组近年来在微喷射及喷射混合方面的理论研究进展。本文分别从微观分子动力学(Molecular Dynamics, MD)和宏观连续介质力学(Continuum Mechanics, CM)层次,回顾微喷射现象国内外数值模拟研究进展及相关建模工作,归纳了当前微喷射数值模拟研究仍存在的一些难点问题。

1 微喷射 MD 模拟进展

MD 是基于材料微观结构建模的确定性模拟方法,分子或原子的运动服从牛顿定律。有关 MD 原理与方法已有大量参考资料,这里不再赘述。随着近年来计算机性能的飞速发展,MD 模拟已成为微喷射物理机制研究的一种主要技术手段。

1993 年,张景琳等^[31]率先开展了微喷射现象的 MD 研究。受当时计算条件限制,该模拟采用二维计算模型和较简单的 Morse 两体势,给出了冲击压力和沟槽角度因素的定性分析,得到的喷射速度与自由面速度的比值在 1~3 之间。虽然未能给出喷射质量的变化规律,但已显示出 MD 方法的独特优势。2002 年,陈军等^[32]结合类紧束缚杂化多体势模拟了金属铜的微喷射现象,基于模拟结果分析了沟槽表面的波系传播以及负压区和正压区的形成,由此解释了沟槽产生微射流的动力学过程。2005 年,陈其峰等^[33]采用大规模 MD 模拟对喷射质量进行了统计分析,见图 4,其中 α 为喷射系数, $\alpha = N_E / N_g$, N_E 和 N_g 分别为喷射粒子数和沟槽缺失粒子数。结果显示,熔化温度之下纳米沟槽射流的最大喷射系数约等于 1,熔化温度之上喷射系数会大幅度增加。与此同时,美国 Los Alamos 实验室 Germann 等开展

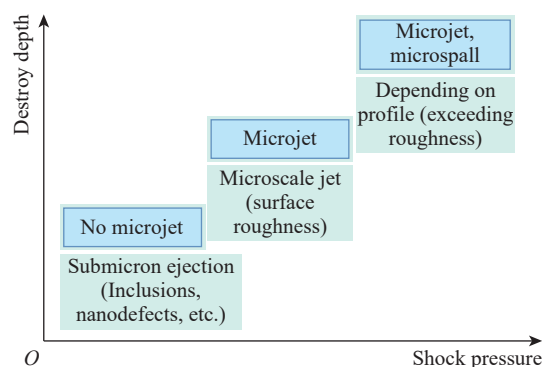
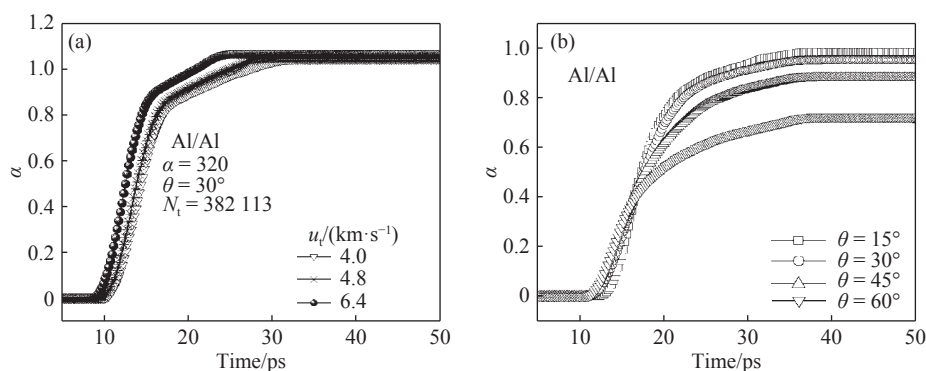


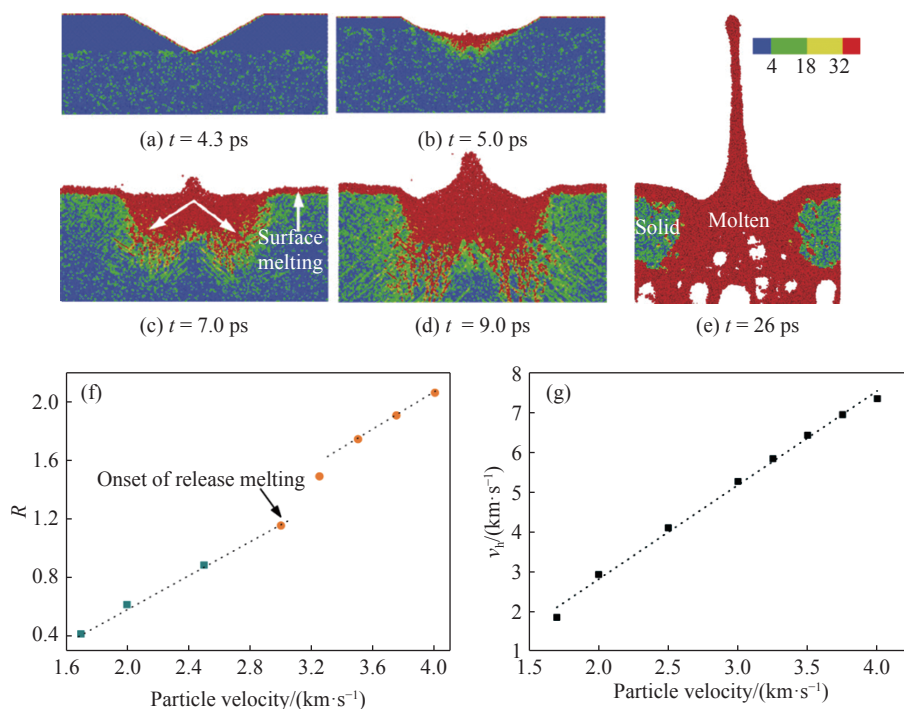
图 3 喷射物形成机制随冲击压力的变化

Fig. 3 Variation of the formation mechanism of ejecta with shock pressure

图 4 喷射系数(α)随时间的变化^[33]Fig. 4 Time evolution of the ejected mass coefficient (α)^[33]

了更大规模的微喷射 MD 模拟,但至今未见详细报道,仅在文献 [34] 中展示了部分微射流形成及断裂的模拟图像。

如前文所说,微喷射质量并不总是对应缺陷质量。对此问题,邵建立等^[35]基于铝的势函数模型,模拟分析了不同冲击压力下的微射流形成过程,重点探讨了材料熔化的影响机制。模拟结果反映了缺陷塌缩局部熔化、卸载和冲击熔化等物理过程。例如,图 5 给出了典型卸载熔化(红色区域)时的射流喷射图像,图中颜色对应原子中心对称参数值。由此可解释熔化导致喷射质量显著增加的部分原因。此外,模拟结果还显示,最大喷射速度对材料是否熔化并不敏感,这与后来的实验结果^[36]是一致的。其原因在于,头部喷射物源于沟槽底部区域,这些物质从早期塌缩便处于熔化状态,卸载熔化则主要影响射流根部物质的流动。

图 5 微射流喷射图像以及喷射系数(R)和头部速度(v_h)随粒子速度的变化^[35]Fig. 5 Microscopic views of microjet formation and variation of the microjetting factor (R) and the head velocity of the microjet (v_h) with the particle velocity^[35]

除冲击压力以外,材料表面形貌是影响微射流发展的另一重要因素。叶建军等^[37]基于金属铜的 MD 模拟,定性比较了楔形、圆形和方形沟槽产生的射流,结果表明,楔形缺陷更容易发生微喷射,且喷射速度随着楔形角的增大而减小。2014 年,李博等^[38]对沟槽角度及缺陷形状进行了序列化 MD 模拟

分析。结果显示,最大喷射速度与自由面速度之比随着半角增加呈线性减小,且不同材料和不同尺度具有相似比值,但喷射系数则在某个中间角度达到最大值。图6为2 km/s碰撞速度下不同沟槽角度的喷射图像及其物质来源比较。此外,模拟结果还显示,晶体结构或缺陷形状的不对称性可引起射流方向的较大改变。

在速度梯度作用下,微射流最终将断裂成一定的颗粒分布状态。Durand 等^[39]基于金属铜的

长时演化模拟研究了微射流断裂颗粒尺度分布,其结果显示喷射颗粒最终会保持球形,尺寸分布呈幂律关系,这与碎片化过程的大多数测量非常一致。之后,通过进一步对金属铜和锡不同表面扰动幅值下微射流破碎^[40]模拟发现,小尺寸极限服从幂律分布,而大尺寸极限服从指数分布。与此同时,何安民等^[41-43]开展了冲击强度与沟槽尺寸等因素的系列模拟分析,详细阐述了喷射颗粒存在的不同分布形式。结果表明,较小尺度颗粒服从包含不同特征常数的幂律分布,而较大尺度颗粒则更满足双指数分布。图7给出了金属铜微射流破碎过程的MD模拟图像,颜色表示粒子速度^[39,43]。近期,吴凤超等^[44]模拟研究了气体环境下喷

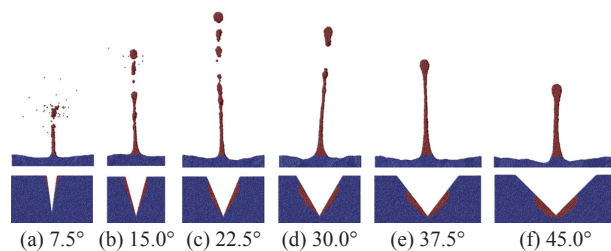


图6 不同沟槽角度对应的微射流及其物质来源^[38]

Fig. 6 Microjets and their sources for different half angles^[38]

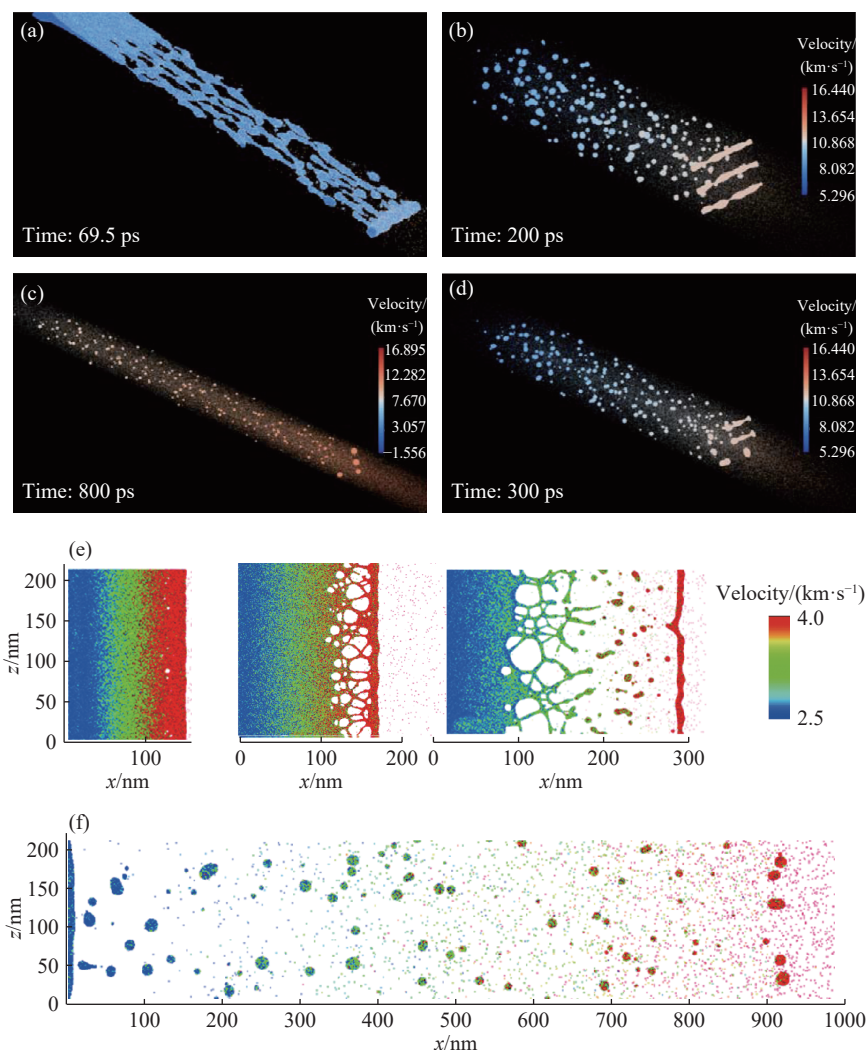


图7 微射流破碎过程模拟图像^[39,43]

Fig. 7 Snapshots of microjet breakup process from MD simulations^[39,43]

射颗粒的形成和演化过程,因涉及物质混合过程,此处不再更多介绍。

当加载波为衰减冲击波时,冲击前沿后的衰减波形不仅影响微射流机制,还会诱发微层裂机制的发生。任国武等^[45]通过控制活塞推动时间模拟了衰减冲击波作用下金属铅的喷射性质。这种控制方法与薄飞片撞击靶板最终形成的衰减冲击波是等同的。模拟结果显示,卸载或冲击熔化条件下喷射体的密度分布曲线因颗粒细小而变得光滑。值得关注的是,小角度周期性表面对应的喷射系数较小(小于 0.6),见图 8,这与前文关于角度效应的模拟分析是一致的。与此同时,邵建立等^[46]模拟了持续和衰减冲击加载下铝的喷射状态,结果显示:在较低的冲击压力下,衰减冲击导致射流质量略有增加;而在较高的冲击压力下,衰减冲击导致微射流质量明显减少。

为进一步理解衰减波形对微射流的影响规律,邵建立等^[47]通过活塞速度历史模拟了不同冲击波形加载情况。结果表明,随着衰减速率的增加,微射流质量呈现先增加后减小的趋势,这一变化正是由于衰减冲击下微层裂的发生,见图 9。图 9(b)中左侧纵坐标 ρ_z/ρ_0 为当前密度与初始密度之比,右侧纵坐标为粒子速度与 2 倍活塞速度之比。当衰减速度较低时,主要表现为对界面的回拉及形状改变,微射流因此被拉长;而当衰减速率较高时,缺陷区域获得的冲击波能量迅速减小,微射流机制明显减弱。微射流和微层裂速度在空间上呈线性分布,微射流具有更高的速度梯度。最近,伍鲍等^[48]通过对低熔点金属锡在持续和非持续冲击下喷射状态模拟和对比分析,进一步论述了加载波形因素的作用规律。

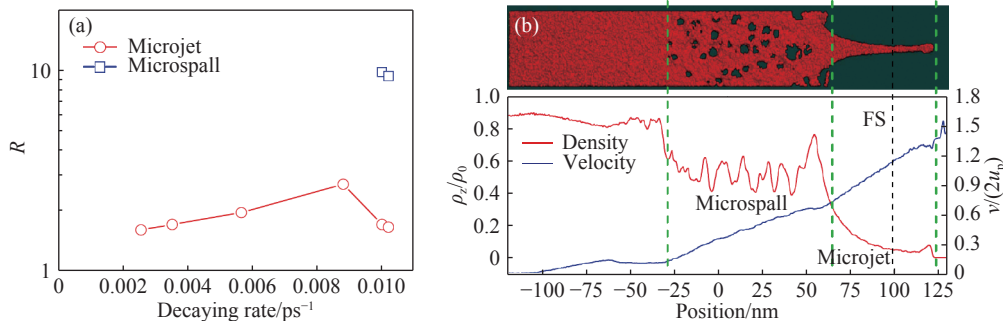


图 9 喷射系数(R)随衰减速率的变化和强衰减冲击下微射流与微层裂共存图像^[47]

Fig. 9 Microjetting factor (R) and microscopic views of microjet and microspall under strong decaying shock^[47]

显然,伴随微层裂机制的出现,微喷射状态已发生本质变化。2008 年, Soulard^[49]便模拟了表面无缺陷金属铜的微层裂过程。结果显示,冲击熔化和卸载熔化两种状态均可得到连续的损伤演化至破碎过程,且微层裂区的拉伸强度可以忽略;但是当熔化速度足够慢时,便可观察到表面固体层裂片的形成。后来,向美珍等^[50]对金属铅的微层裂过程进行了 MD 模拟,着重分析了经典层裂和微层裂空穴形核数量和空间分布的差异及应力演化差异,并通过不同位置的热力学路径分析解读了表面和内部微层裂的差异,见图 10。

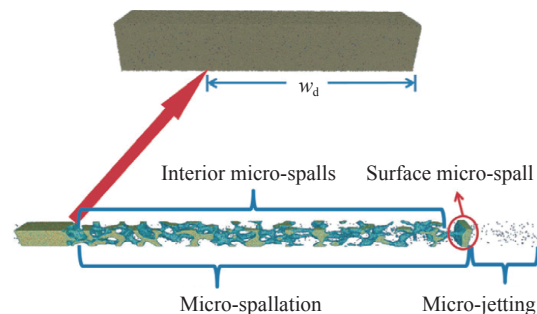


图 10 内部和表面微层裂图像及破坏物质对应的初始宽度(w_d)^[50]

Fig. 10 Views of interior microspalls and surface microspall and the Lagrangian width of the damaged zone (w_d)^[50]

此外,廖异等^[51]进一步对低熔点金属锡的微层裂过程进行了模拟,给出了锡材料中孔洞成核及破坏过程的分析。邵建立等^[52-53]基于不同碰撞速度下微层裂过程的模拟,分析了熔化前后的破坏形态差异(见图11)及破坏深度的变化,并通过对冲击压力峰值和衰减波形的系列模拟,给出了一般三角形波作用下下层裂片厚度和损伤深度的估算方法。

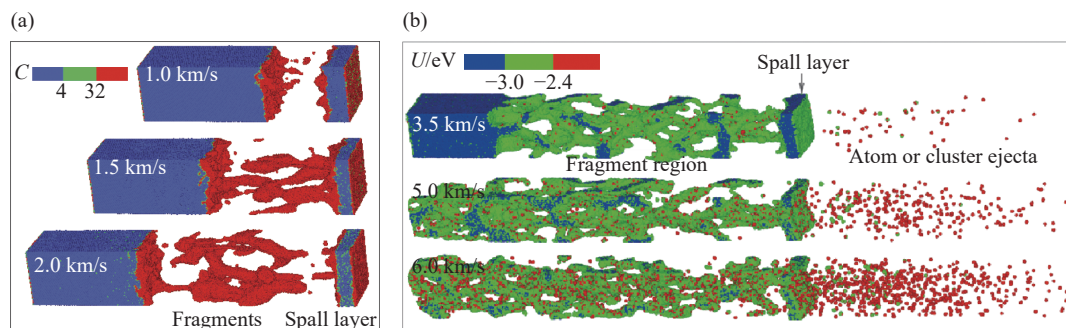


图 11 熔化前后损伤状态转变的微观图像^[52]

Fig. 11 Microscopic views of damage before melting and after melting^[52]

2 微喷射 CM 模拟进展

光滑粒子流体动力学(Smoothed Particle Hydrodynamics, SPH)方法是一种无网格的拉氏计算方法,易于处理大变形问题;欧拉数值方法把网格固定在空间上,允许物质的大变形和流动。至今,微喷射现象的CM模拟研究主要采用这两类方法。2004年,王裴等^[54]采用SPH方法模拟了冲击加载下金属表面沟槽的射流现象,分析了喷射物的总质量、最大速度和质量-速度曲线,模拟结果与实验结果基本符合,表明SPH方法是模拟微射流的一种有效手段。图12为冲击加载(上)和具有一定加载波前沿宽度加载(下)的微射流形成过程。

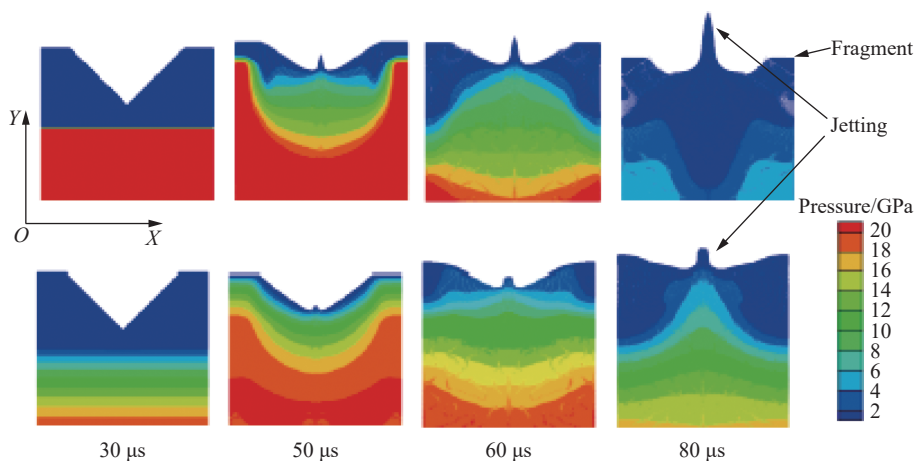
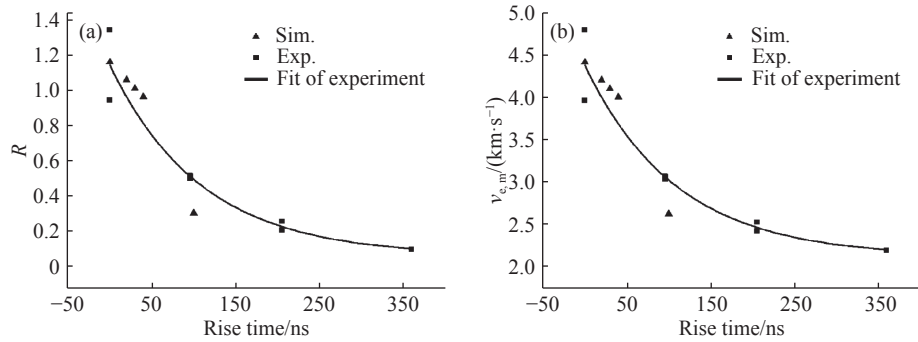
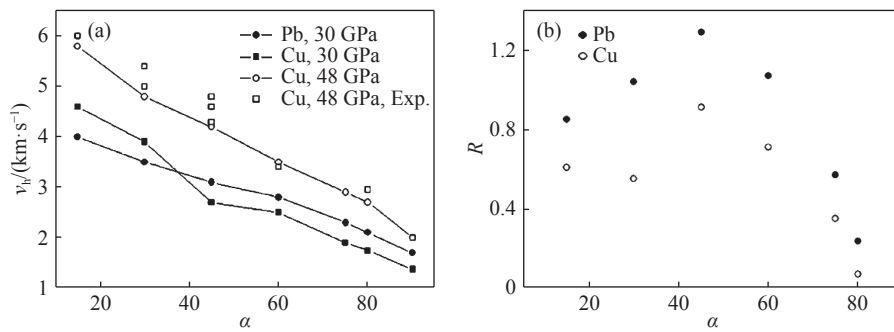


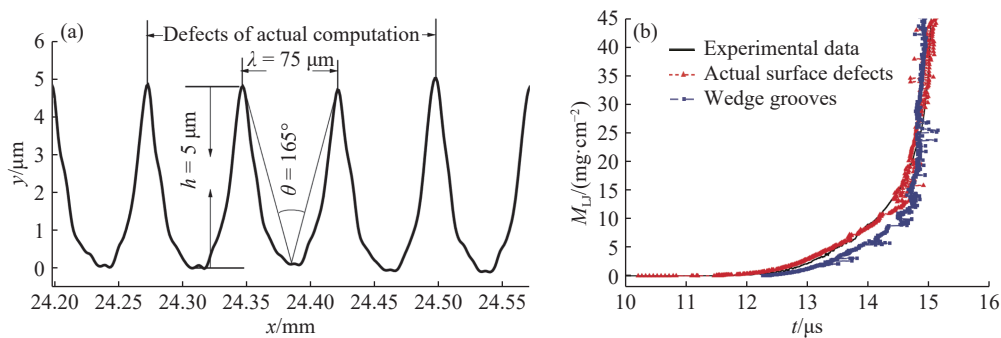
图 12 SPH 模拟的微射流形成过程^[55]

Fig. 12 SPH simulation of microjet formation process^[55]

随后,王裴等^[56]基于SPH模拟结果分析了加载波前沿上升时间对微射流的影响规律。结果表明,随着加载波前沿宽度增加,微射流质量和头部速度都会减小,同时低速喷射物所占比例增大,这是由于沟槽斜面粒子的碰撞速度降低,碰撞角度增大,导致部分粒子达到射流强度封锁条件而不再形成射流,见图13。通过金属铅和铜表面沟槽冲击微射流过程模拟^[57],进一步给出了头部速度和喷射系数随沟槽夹角的变化。结果显示,喷射系数在沟槽半角为45°时达到最大值,随着角度的增加或减小,喷射系数均会减小;而最大喷射速度随沟槽角度的增加近似成线性减小,见图14。此外,通过追踪粒子运动轨迹分析了微射流物质来源,发现随着沟槽夹角增加,射流物质来源由沟槽两侧逐步向沟槽底部过渡。

图 13 微射流喷射系数(R)和最大喷射速度($v_{e,m}$)随加载波前沿上升时间的变化^[56]Fig. 13 Variations of jetting factor(R) and the maximum jetting velocity ($v_{e,m}$) with the wave-front rise time^[56]图 14 微射流头部速度(v_h)和喷射系数(R)随沟槽半角(α)的变化^[57]Fig. 14 Head velocity of microjet (v_h) and the jetting factor (R) change with the half angle of groove (α)^[57]

此前, 大多数数值模拟都采用了楔形槽等简化模型, 为细致考察表面形貌这一变化因素, 赵信文等^[58]根据样品表面形貌的实测结果进行了 SPH 建模和模拟。结果表明, 基于实测样品缺陷建模的计算结果与实验结果更加符合, 见图 15。分析发现, 在实测样品缺陷诱导微喷射过程中存在“二次汇聚喷射”机制, 与单次喷射相比, 该机制可产生更高速度的喷射物, 并影响微喷射物的空间密度分布。这再次表明表面微细结构对微喷射现象的影响是显著的。

图 15 样品表面缺陷形貌(a)和微喷射累计质量(M_{LJ})(b)^[58]Fig. 15 The profile of the surface defect (a) and the cumulative mass (M_{LJ}) of ejection (b)^[58]

上述 CM 模拟主要关注了持续冲击下微射流形成及质量累计过程。为从 CM 角度理解衰减冲击下近表面破坏模式与复杂喷射状态, 刘文斌等^[59]采用 SPH 方法模拟了三角波加载下微喷射现象。根据模拟结果, 可将三角波加载下喷射物的空间分布分为高速颗粒、射流杆体、纵向散碎和复杂断裂等多个区域, 显然这与持续冲击下的尖钉-气泡结构有本质不同。统计结果显示, 在相同的冲击压力峰值下, 三角波加载产生的高速喷射物明显减少, 但会产生更多的低速喷射物, 因此总的喷射质量明显增加。

换句话说,此时衰减波形是决定喷射总量的主要因素,表面缺陷主要决定喷射物的分布状态,见图16。此前, Rességuier 等^[60]曾利用 SPH 模拟结果解读了其激光加载微喷射实验。

利用 Los Alamos 国家实验室开发的欧拉有限差分程序 PAGOSA, Kullback 等^[61]模拟研究了不同扰动幅值、波数和几何形状情况下的微喷射过程。图17给出了几种典型喷射状态,该模拟中采用了 Mie-Grüniesen 状态方程和弹性理想塑性强度模型。结果表明,总的微喷射质量取决于初始扰动幅值和波数的乘积。微喷射质量随该乘积呈现阶段性变化,且当该乘积超过某阈值时,喷射质量便呈现出单调增加趋势。此外,刘超等^[62-63]采用二维弹塑性流体力学欧拉程序 MEPH, 模拟分析了不同形状、不同角度沟槽缺陷的最大喷射速度及喷射系数的变化规律,并进一步讨论了不同缺陷形状对喷射速度和喷射系数的影响。相关结论与前文 SPH 模拟和实验基本吻合。

通过对 MD 和 CM(PAGOSA 程序)模拟结果的综合分析,见图18(图中时间 τ 和位置 $k(Z-Z_0)$ 均以沟槽尺寸进行了缩比), Dimonte 等^[64]提出了一个简单的微喷射代数模型,该

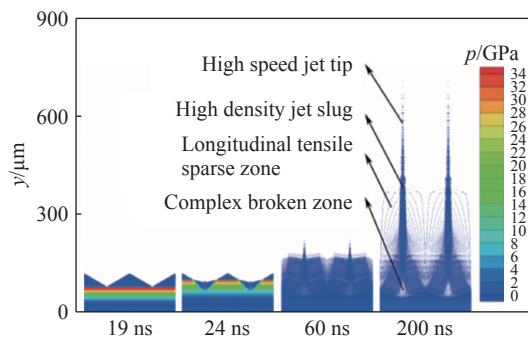


图16 三角波加载下微喷射 SPH 模拟图像^[60]

Fig. 16 SPH simulation of microjet views driven by decaying shock^[60]

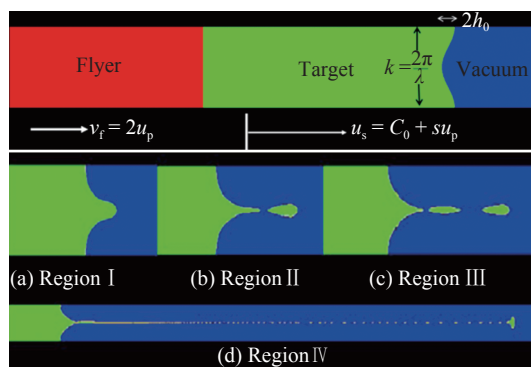


图17 欧拉模拟得到的喷射状态的不同区域^[61]

Fig. 17 Different regions of jetting state given by Euler simulation^[61]

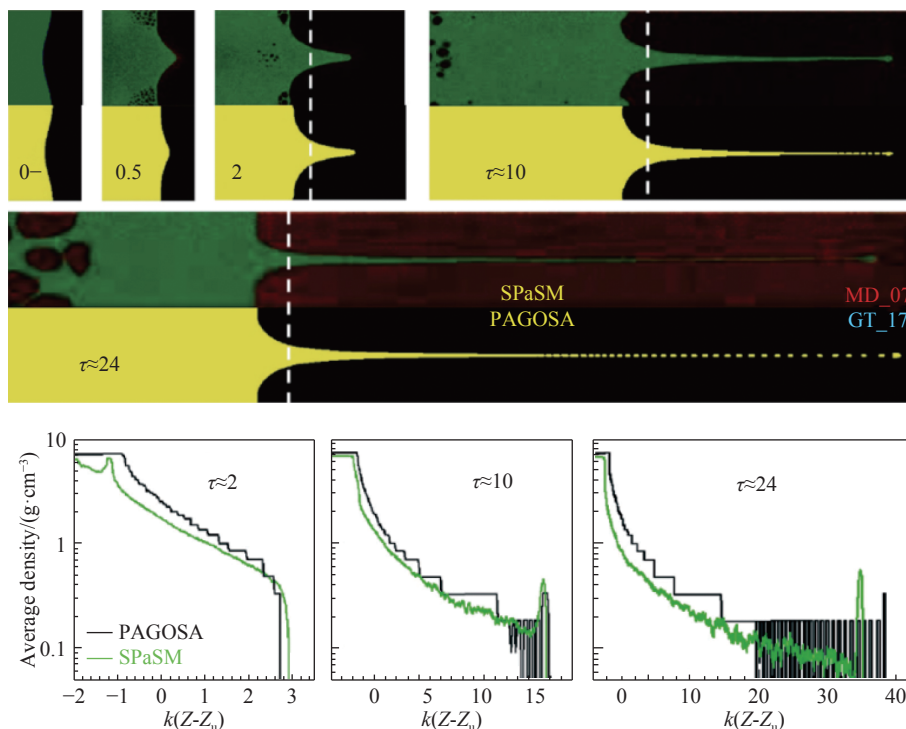


图18 微喷射 CM 和 MD 模拟结果比较^[64]

Fig. 18 Comparison of CM and MD simulation results of microjet^[64]

模型中微喷射面密度是由冲击后的金属密度和饱和的气泡幅值决定的,该模型与 MD 和 CM 模拟结果一致,并已被实验验证。Cherne 等^[65]同样基于 MD (SPaSM 程序)和 CM (FLASH 程序)模拟,对多种材料的不同表面形貌进行了一系列数值分析。由此将上述喷射质量公式拓展至多种表面形状。

与此同时,其他更多工作也采用了 MD 和 CM 模拟的联合分析^[66-67]。其中, Dyachko 等^[66]对锡样品进行了 MD 和 SPH 对比模拟,见图 19,图中 v_{sp} 和 v_b 分别为尖钉和气泡的速度, ak 表示扰动幅值。SPH 模拟采用真实的实验尺寸, MD 则采用比例缩放的样品尺寸。结果表明, MD 和 SPH 模拟的射流速度和质量分布基本一致,表面张力对小尺度样品喷射射流的深刻影响可以部分解释 MD 和实验中观察到的峰值速度差异。此外, Durand 等^[67]采用大规模 MD 和 CM 模拟开展了相近尺寸的数值模拟。CM 方法采用基于自适应网格细化的欧拉流体动力学方法,其状态方程由 MD 模拟得到。模拟结果表明, CM 模拟得到的射流轮廓、质量和速度与 MD 方法所得结果一致,见图 20,并指出材料的黏性和表面张力对 CM 模拟结果有很大影响,是 CM 建模中值得关注的问题。

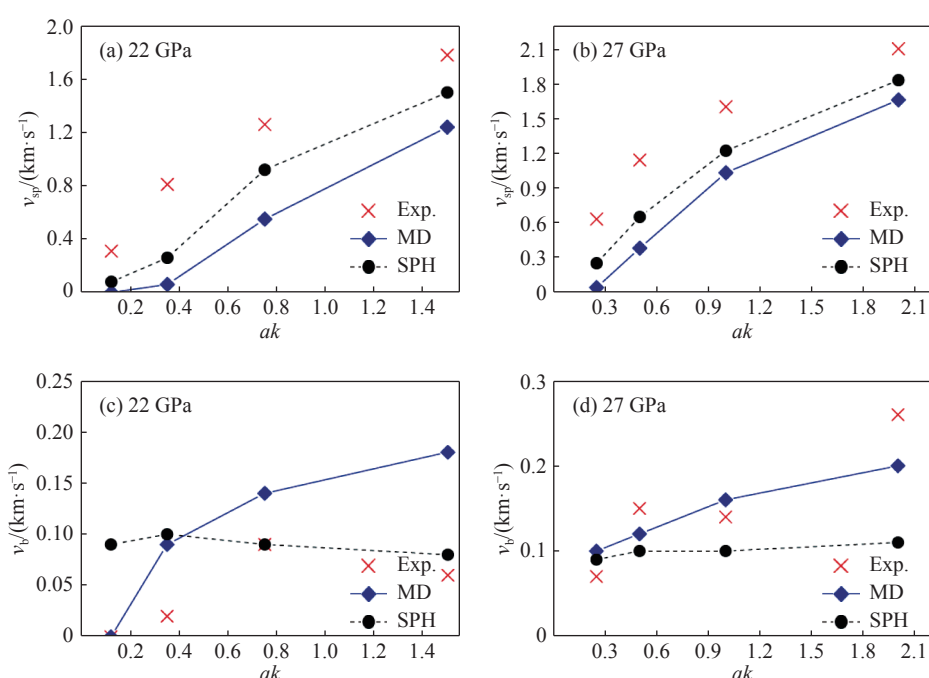


图 19 SPH 模拟与 MD 模拟及实验结果比较^[66]

Fig. 19 Comparison of SPH simulation, MD simulation and experimental results^[66]

3 基于数值模拟规律的建模进展

通过对微喷射现象的数值模拟研究,希望建立包含材料性质、表面状态及动力学条件等因素的喷射物质总量、质量-速度及颗粒尺度分布模型,以应用于工程力学问题的量化模拟中^[6]。在早期研究中, Asay 等^[4]基于实验规律提出了一个由表面缺陷质量估算喷射总量的模型。韩长生^[68]从经典射流理论出发,基于“等效金属罩质量”假设,推导了定常流动下冲击波与楔形槽表面正规与非正规反射条件下微射流质量的半经验公式。这些模型可以大致描述部分实验结果,

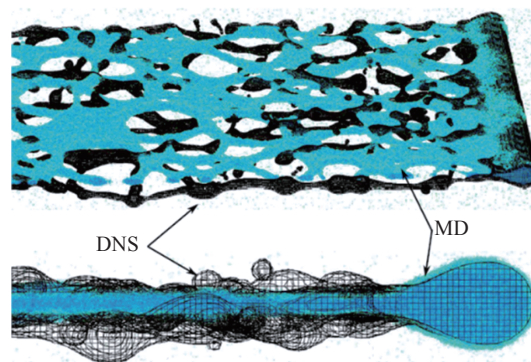


图 20 DNS 和 MD 模拟片状射流的比较^[67]

Fig. 20 Comparison of the ejected sheets obtained with MD and DNS^[67]

然而由于模型过于简化,无法描述更宽范围的实验数据及其变化规律,比如,喷射物总量与缺陷深度、沟槽角度或波长的关系,更为严重的是无法反映熔化前后材料喷射状态的显著差异。

随着数值模拟研究的不断深入,建模工作也取得可喜进展。2011年,Georgievskaya等^[69]基于不可压流体和小扰动假设,根据 Richtmyer-Meshkov(RM)不稳定性理论给出了喷射质量随时间演化的近似方程,并通过数值计算验证其估算的正确性。之后,Dimonte等^[64]假设微射流总量由RM气泡饱和振幅决定,建立了与表面初始扰动相关的微射流总量模型。2015年,Cherne等^[65]对上述模型进一步修正,引入抛物型气泡形状的假设,以及初始扰动相位反转的时间修正因子,最终构建了描述微射流总量以及最大速度随材料性质、表面扰动状态以及加载动力学条件变化的理论模型,并将其推广至不同形貌表面缺陷微射流喷射状态的描述。

$$m(t) = \frac{2}{3}m_0 \ln \left[1 + \frac{t - \Delta t}{\left(\beta + \frac{\Delta t}{\tau} \right) \tau} \right] \quad t \geq \Delta t \quad (1)$$

$$\dot{\eta}^s = \sqrt{3}\dot{\eta}_0^s, \quad \dot{\eta}_0^{b,s} = F_1 F_{nl}^{b,s} |k h_0 \Delta u| \quad (2)$$

式中: $m(t)$ 为 t 时刻的喷射面密度”, m_0 为初始缺陷面密度, Δt 为扰动反转特征时间, β 为时间尺度因子, τ 为约化时间, $\dot{\eta}^s$ 为尖钉渐近增长速度, $\dot{\eta}_0^{b,s}$ 为气泡或尖钉的线性增长阶段的最大速度, F_1 为线性冲击压缩因子, $F_{nl}^{b,s}$ 为非线性关联因子, k 为初始扰动波数, h_0 为初始扰动振幅, Δu 为表面速度。该模型可以较好地描述熔化状态下金属微射流总量与最大速度的不同尺度(包括MD和CM)数值模拟结果以及相关实验数据,是微喷射理论建模研究的重要进展。

根据强度介质不稳定性理论,未熔化材料仍可发生界面塑性流动失稳。在此情况下,虽然强度效应会抑制界面不稳定性的发展,但在特定状态下RM尖钉会持续增长,最终断裂破碎而形成物质喷射。为进一步发展强度介质微喷射模型,何安民等^[70]基于弹塑性欧拉数值模拟获得的强度介质扰动增长与物质喷射之间的内在联系,结合理想弹塑性固体界面RM不稳定性理论,构建了强度介质微喷射总量模型,即

$$\sigma_{ej}^{\max} = \frac{2}{3} \alpha \rho_0 |\eta_b^{\max}| \quad (3)$$

$$\eta_b^{\max} = \eta_0 - \frac{2}{3k} \ln \left[1 + \frac{\rho_0}{2Y} |\dot{\eta}_0|^2 \right] \quad (4)$$

式中: $\sigma_{ej}^{\max}$ 为强度介质最大喷射质量, α 取为0~1之间小数, ρ_0 为材料初始密度, $\eta_b^{\max}$ 为气泡饱和振幅, η_0 为初始扰动振幅, k 为初始扰动波数, Y 为材料的等效屈服强度。

综合上述强度介质和纯流体微喷射模型,可以给出平面冲击下宽压力区间的喷射总量和最大速度的一般描述。然而对于更复杂的加载条件,则必须考虑实际波形等因素。对于爆轰、激光等加载波形条件,借助经验模型或判据条件,已进行部分数值模拟分析^[71-73]。其中,张凤国等^[74]基于应力波传播理论,采用应力瞬时断裂判据和损伤累积判据,分析了简单三角波强加载下延性金属的多次层裂破坏问题,给出了层裂片厚度对冲击波宽度与强度的比值的变化的变化,在强冲击加载条件下,破坏深度约为冲击波宽度的一半。最近,邵建立等^[53]基于MD模拟分析了不同衰减冲击波下金属铅的破坏形态和深度变化,结合模拟得到的样品内部拉应力和密度变化,给出了表面层裂片厚度和样品破坏深度的近似公式,即

$$T_s = \frac{\lambda \rho_s \sigma_s}{2 \rho_0 \sigma_b}, \quad D_d = \frac{\lambda \rho_d}{2 \rho_0} \left(1 - \frac{\sigma_s}{2 \sigma_b} \right) \quad (5)$$

式中: T_s 为层裂片厚度, λ 为三角波宽度, ρ_s 和 ρ_d 分别为层裂片和破坏区的平均密度, ρ_0 为材料初始密度, σ_s 和 σ_b 分别为层裂应力和冲击应力峰值。

关于喷射物颗粒尺度的信息,可以采用幂律关系和指数关系来描述其终态分布,但其中主要参数的取值还很难从理论上确定。实际上,MD方法可以直接模拟出颗粒化全过程,但还局限于纳米尺度

和极端应变率条件,与实际情况下的断裂颗粒还相差很大。而从 CM 角度,采用射流失稳断裂^[73]、能量破碎等理论^[74]可以对颗粒尺度进行估算,但这依然包含较多经验判据或参数,对实际状态下颗粒度的定量化分析仍然具有较高难度。

4 总结与展望

至今,微喷射现象研究已有 60 余年的历史,微喷射现象的主要特征及喷射物产生机制已被充分阐明,该领域研究正在蓬勃发展^[29]。目前微喷射现象数值模拟主要包括微观尺度 MD 和宏观尺度 CM 两类方法,前者侧重于物理机理揭示,后者侧重于动力学分析。不同物理尺度模拟的对比分析受到越来越多的关注。根据研究现状,微喷射数值模拟仍存在以下几方面难点问题。

(1)微喷射现象的多物理尺度模拟。微喷射是典型的多尺度演化问题,现有模拟手段还局限于微观或宏观尺度,为发展更具物理基础的建模,需要特别关注不同物理尺度的耦合建模与模拟方法,从材料结构和动力学两方面深化对微喷射现象的量化规律认识。

(2)强冲击加卸载下表面区域的材料模型。实际上,表面物质与内部质点经历的力学途径存在明显差异,当我们重点关注表面物质演化时,需要考虑材料模型及参数的适用性,比如,Dimonte 等^[75]便利用不稳定性增长来反推材料表面区域的等效屈服强度。

(3)表面几何形貌和加载波形的复杂相互作用。冲击波与粗糙表面的相互作用实际上是一个三维或者准二维问题,在衰减冲击条件下可出现复杂的表面拉应力区,这会影响甚至改变近表面物质的破坏模式。这对于理解微喷射全局状态,尤其是低速喷射物的分布十分重要。

希望本文能为后续微喷射及相关领域的数值模拟与建模研究提供有益参考。

参考文献:

- [1] WALSH J M, SHREFFLER R G, WILLIG F J. Limiting conditions for jet formation in high velocity collisions [J]. *Journal of Applied Physics*, 1953, 24(3): 349–359.
- [2] ASAY J R, MIX L P, PERRY F C. Ejection of material from shocked surfaces [J]. *Applied Physics Letters*, 1976, 29(5): 284–287.
- [3] ASAY J R. A model for estimating the effects of surface roughness on mass ejection from shocked materials: SAND78-1256 [R]. Albuquerque, NM, US: Sandia National Laboratories, 1978.
- [4] ASAY J R. Material ejection from shock-loaded free surface of aluminum and lead: SAND76-0542 [R]. Albuquerque, NM, US: Sandia National Laboratories, 1976.
- [5] 朱建士, 胡晓棉, 王裴, 等. 爆炸与冲击动力学若干问题研究进展 [J]. *力学进展*, 2010, 40(4): 400–423.
ZHU J S, HU X M, WANG P, et al. A review on research progress in explosion mechanics and impact dynamics [J]. *Advances in Mechanics*, 2010, 40(4): 400–423.
- [6] FUNG J, HARRISON A K, CHITANVIS S, et al. Ejecta source and transport modeling in the FLAG hydrocode [J]. *Computers & Fluids*, 2013, 83(16): 177–186.
- [7] ANDRIOT P, CHAPRON P, OLIVE F. Ejection of material from shocked surfaces of tin, tantalum and lead-alloys [J]. *AIP Conference Proceedings*, 1982, 78: 505–509.
- [8] 曾鉴荣, 庄以河. 动载荷下金属板表面的微物质喷射 [J]. *高压物理学报*, 1987, 1(1): 88–92.
ZENG J R, ZHUANG Y H. Mass ejection from free surface of shock-loaded metallic plates [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 1987, 1(1): 88–92.
- [9] SORENSON D S, MINICH R W, ROMERO J L, et al. Ejecta particle size distributions for shock loaded Sn and Al metals [J]. *Journal of Applied Physics*, 2002, 92(10): 5830–5836.
- [10] OGORODNIKOV V A, MIKHAILOV A L, BURTSEV V V, et al. Detecting the ejection of particles from the free surface of a shock-loaded sample [J]. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2009, 109(3): 530–535.
- [11] ZELLNER M B, MCNEIL W V, HAMMERBERG J E, et al. Probing the underlying physics of ejecta production from shocked

- Sn samples [J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 103(12): 123502.
- [12] CHEN Y, HU H, TANG T, et al. Experimental study of ejecta from shock melted lead [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(5): 053509.
- [13] MONFARED S K, ORÓ D M, GROVER M, et al. Experimental observations on the links between surface perturbation parameters and shock-induced mass ejection [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 116(6): 063504.
- [14] 马云, 汪小松, 李欣竹, 等. ASAY 膜法测量微物质喷射总质量不确定度的初步实验研究 [J]. *高压物理学报*, 2006, 20(2): 207–210.
- MA Y, WANG X S, LI X Z, et al. Study of the uncertainty of the ejected Mass measured by ASAY foil method [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2006, 20(2): 207–210.
- [15] VOGAN W S, ANDERSON W W, GROVER M, et al. Piezoelectric characterization of ejecta from shocked tin surfaces [J]. *Journal of Applied Physics*, 2005, 98(11): 113508.
- [16] 文雪峰, 王健, 王晓燕, 等. 微喷射物质作用下脉冲信号电探针的放电机理 [J]. *爆炸与冲击*, 2017, 37(5): 887–892.
- WEN X F, WANG J, WANG X Y, et al. Discharging mechanism of pulse signal electric probe conducted by micro-jetting [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2017, 37(5): 887–892.
- [17] 叶雁, 李军, 朱鹏飞, 等. 脉冲 X 光照相在微物质喷射诊断中的应用 [J]. *高压物理学报*, 2013, 27(3): 398–402.
- YE Y, LI J, ZHU P F, et al. Flash X-ray radiography for diagnosing the ejecta from shocked metal surface [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2013, 27(3): 398–402.
- [18] 张林, 李英华, 程晋明, 等. 激光驱动 X 光背光照相技术在金属靶微层裂研究中的应用探索 [J]. *强激光与粒子束*, 2016, 28(4): 23–27.
- ZHANG L, LI Y H, CHENG J M, et al. Exploration of laser-driven X-ray backlighting applied in research of micro-spalls of metal target [J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2016, 28(4): 23–27.
- [19] SORENSON D S, PAZUCHANICS P, JOHNSON R P, et al. Ejecta particle-size measurements in vacuum and helium gas using ultraviolet in-line Fraunhofer holography: LA-UR-14-24722 [R]. Los Alamos, NM: Lawrence Livermore National Laboratory, 2014.
- [20] 叶雁, 汪伟, 李作友, 等. 用高速摄影和脉冲同轴全息照相联合诊断微射流 [J]. *高压物理学报*, 2009, 23(6): 471–475.
- YE Y, WANG W, LI Z Y, et al. High-speed photography and pulsed in-line holography diagnostics of microjet [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2009, 23(6): 471–475.
- [21] 汪伟, 李作友, 李欣竹, 等. 用超高速阴影摄影技术研究微喷射现象 [J]. *应用光学*, 2008, 29(4): 526–529.
- WANG W, LI Z Y, LI X Z, et al. Study on micro-jet on ultra-high speed shadow photography [J]. *Journal of Applied Optics*, 2008, 29(4): 526–529.
- [22] BUTTLER W T, ORÓ D M, PRESTON D, et al. The study of high-speed surface dynamics using a pulsed proton beam [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2012, 1426: 999–1002.
- [23] HAMMERBERG J E, BUTTLER W T, LLOBET A, et al. Proton radiography measurements and models of ejecta structure in shocked Sn [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2018, 1979: 080006.
- [24] ZELLNER M B, VUNNI G B. Photon Doppler velocimetry (PDV) characterization of shaped charge jet formation [J]. *Procedia Engineering*, 2013, 58: 88–97.
- [25] FRANZKOWIAK J E, PRUDHOMME G, MERCIER P, et al. PDV-based estimation of ejecta particles' mass-velocity function from shock-loaded tin experiment [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2018, 89(3): 033901.
- [26] DE RESSÉGUIER T, LOISON D, LESCOUTE E, et al. Dynamic fragmentation of laser shock-melted metals: some experimental advances [J]. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2010, 48: 957–972.
- [27] 辛建婷, 谷渝秋, 李平, 等. 强激光加载下金属材料微喷回收诊断 [J]. *物理学报*, 2012, 61(23): 381–385.
- XIN J T, GU Y Q, LI P, et al. Study on metal ejection under laser shock loading [J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(23): 381–385.
- [28] HE W, XIN J, CHU G, et al. Investigation of fragment sizes in laser-driven shock-loaded tin with improved watershed segmentation method [J]. *Optics Express*, 2014, 22(16): 18924–18933.
- [29] BUTTLER W T, WILLIAMS R J R, NAJJAR F M. Foreword to the special issue on ejecta [J]. *Journal of Dynamic Behavior of Materials*, 2017, 3(2): 151–155.
- [30] 王裴, 何安民, 邵建立, 等. 强冲击作用下金属界面物质喷射与混合问题数值模拟和理论研究 [J]. *中国科学: 物理学 力学*

- 天文学, 2018, 48(9): 106–116.
- WANG P, HE A M, SHAO J L, et al. Numerical and theoretical investigations of shock-induced material ejection and ejecta-gas mixing [J]. *Scientia Sinica Physica, Mechanica & Astronomica*, 2018, 48(9): 106–116.
- [31] 张景琳, 王继海, 杨淑霞. 材料微喷射和动态损伤的分子动力学研究 [J]. *计算物理*, 1993, 10(3): 318–324.
- ZHANG J L, WANG J H, YANG S X. Molecular dynamics research of ejection and damage of metals induced by reflection of shock wave at free surface [J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 1993, 10(3): 318–324.
- [32] CHEN J, JING F Q, ZHANG J L, et al. Dynamics simulation of ejection of metal under a shock wave [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, 14(44): 10833.
- [33] CHEN Q F, CAO X L, ZHANG Y, et al. Parallel molecular dynamics simulations of ejection from the metal Cu and Al under shock loading [J]. *Chinese Physics Letters*, 2005, 22(12): 3151–3154.
- [34] HOLIAN B L. Molecular dynamics comes of age for shockwave research [J]. *Shock Waves*, 2004, 13(6): 489–495.
- [35] SHAO J L, WANG P, HE A M, et al. Atomistic simulations of shock-induced microjet from a grooved aluminium surface [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(15): 153501.
- [36] DE RESSÉGUIER T, LESCOUTE E, SOLIER A, et al. Microjetting from grooved surfaces in metallic samples subjected to laser driven shocks [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(4): 043525.
- [37] 叶建军, 杨健, 郑津洋, 等. 金属材料动态损伤的微观数值模拟 [J]. *江苏大学学报(自然科学版)*, 2007(1): 41–45.
- YE J J, YANG J, ZHENG J Y, et al. Micro-scale numerical simulation on dynamic damage for metal materials [J]. *Journal of Jiangsu University (Natural Science Edition)*, 2007(1): 41–45.
- [38] LI B, ZHAO F P, WU H A, et al. Microstructure effects on shock-induced surface jetting [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(7): 073504.
- [39] DURAND O, SOULARD L. A new method for large scale molecular dynamics simulations of shock induced ejecta [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2012, 1426: 1247–1250.
- [40] DURAND O, SOULARD L. Power law and exponential ejecta size distributions from the dynamic fragmentation of shock-loaded Cu and Sn metals under melt conditions [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 114(19): 194902.
- [41] HE A M, WANG P, SHAO J L, et al. Molecular dynamics simulations of jet breakup and ejecta production from a grooved Cu surface under shock loading [J]. *Chinese Physics B*, 2014, 23(4): 047102.
- [42] HE A M, WANG P, SHAO J L. Molecular dynamics simulations of ejecta size distributions for shock-loaded Cu with a wedged surface groove [J]. *Computational Materials Science*, 2015, 98: 271–277.
- [43] HE A M, WANG P, SHAO J L. Statistically heterogeneous size distribution of ejecta from shock-loaded Cu with a wedged surface groove [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, 24(2): 025002.
- [44] WU F C, ZHU Y B, LI X Z, et al. Peculiarities in breakup and transport process of shock-induced ejecta with surrounding gas [J]. *Journal of Applied Physics*, 2019, 125(18): 185901.
- [45] REN G, CHEN Y, TANG T, et al. Ejecta production from shocked Pb surface via molecular dynamics [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 116(13): 133507.
- [46] SHAO J L, WANG P, HE A M. Microjetting from a grooved Al surface under supported and unsupported shocks [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 116(7): 073501.
- [47] SHAO J L, WANG P, HE A M. Influence of shock pressure and profile on the microjetting from a grooved Pb surface [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2017, 25(1): 015011.
- [48] WU B, WU F C, ZHU Y B, et al. Molecular dynamics simulations of ejecta production from sinusoidal tin surfaces under supported and unsupported shocks [J]. *AIP Advances*, 2018, 8(4): 045002.
- [49] SOULARD L. Molecular dynamics study of the micro-spallation [J]. *The European Physical Journal D*, 2008, 50(3): 241–251.
- [50] XIANG M, HU H, CHEN J, et al. Molecular dynamics simulations of micro-spallation of single crystal lead [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2013, 21(5): 055005.
- [51] LIAO Y, XIANG M, ZENG X, et al. Molecular dynamics study of the micro-spallation of single crystal tin [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95: 89–98.
- [52] SHAO J L, WANG P, HE A M, et al. Molecular dynamics study on the failure modes of aluminium under decaying shock loading [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(16): 163507.
- [53] SHAO J L, WANG C, WANG P, et al. Atomistic simulations and modeling analysis on the spall damage in lead induced by

- decaying shock [J]. *Mechanics of Materials*, 2019, 131: 78–83.
- [54] 王裴, 秦承森, 张树道, 等. SPH 方法对金属表面微射流的数值模拟 [J]. *高压物理学报*, 2004, 18(2): 149–156.
WANG P, QIN C S, ZHANG S D, et al. Simulated microjet from free surface of aluminum using smoothed particle hydrodynamics [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2004, 18(2): 149–156.
- [55] WANG P, LI T, SHAO J L, et al. Effect of wave-front width on micro-jet from a shocked aluminum surface [J]. *Procedia Engineering*, 2011, 10: 3327–3332.
- [56] 王裴, 邵建立, 秦承森. 加载波前沿宽度对铝表面微射流的影响 [J]. *物理学报*, 2009, 58(12): 1064–1070.
WANG P, SHAO J L, QIN C S. Effect of loading-wave-front width on micro-jet from aluminum surface [J]. *Acta Physica Sinica*, 2009, 58(12): 1064–1070.
- [57] 王裴, 邵建立, 秦承森. 沟槽角度对金属表面微射流性质的影响 [J]. *物理学报*, 2012, 61(23): 321–327.
WANG P, SHAO J L, QIN C S. Groove angle effect on micro-jet from shocked metal surface [J]. *Acta Physica Sinica*, 2012, 61(23): 321–327.
- [58] 赵信文, 李欣竹, 王学军, 等. 金属表面几何缺陷微细结构对微喷射特性的影响 [J]. *物理学报*, 2015, 64(12): 285–291.
ZHAO X W, LI X Z, WANG X J, et al. Effects of surface groove micro-structure on ejection from shocked metal surface [J]. *Acta Physica Sinica*, 2015, 64(12): 285–291.
- [59] LIU W B, MA D J, HE A M, et al. Ejecta from periodic grooved Sn surface under unsupported shocks [J]. *Chinese Physics B*, 2018, 27(1): 016202.
- [60] DE RESSÉGUIER T, PRUDHOMME G, ROLAND C, et al. Picosecond x-ray radiography of microjets expanding from laser shock-loaded grooves [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 124(6): 065106.
- [61] KULLBACK B A, TERRONES G, CARRARA M D, et al. Quantification of ejecta from shock loaded metal surfaces [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2012, 1426: 995–998.
- [62] 刘超, 秦承森, 冯其京, 等. 缺陷形状对铝材料微喷射的影响 [J]. *计算物理*, 2016, 26(2): 275–280.
LIU C, QIN C S, FENG Q J, et al. Effect of groove angle on ejecting mass [J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2016, 26(2): 275–280.
- [63] 刘超, 王裴, 秦承森, 等. 冲击压力及加载速率对沟槽微射流的影响 [J]. *计算物理*, 2010, 27(2): 190–194.
LIU C, WANG P, QIN C S, et al. Effect of pressure and shock wave risetime on material ejection [J]. *Chinese Journal of Computational Physics*, 2010, 27(2): 190–194.
- [64] DIMONTE G, TERRONES G, CHERNE F J, et al. Ejecta source model based on the nonlinear Richtmyer-Meshkov instability [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(2): 024905.
- [65] CHERNE F J, HAMMERBERG J E, ANDREWS M J, et al. On shock driven jetting of liquid from non-sinusoidal surfaces into a vacuum [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 118(18): 185901.
- [66] DYACHKOV S A, PARSHIKOV A N, ZHAKHOVSKY V V. Shock-produced ejecta from tin: comparative study by molecular dynamics and smoothed particle hydrodynamics methods [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2015, 653(1): 012043.
- [67] DURAND O, JAOUEN S, SOULARD L, et al. Comparative simulations of microjetting using atomistic and continuous approaches in the presence of viscosity and surface tension [J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 122(13): 135107.
- [68] 韩长生. 估算冲击加载下材料自由面微射喷射量的一个半经验解析公式 [J]. *高压物理学报*, 1989, 3(3): 234–240.
HAN C S. A semi-empirical equation for estimating the micro-jet ejection from shocked free-surface [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 1989, 3(3): 234–240.
- [69] GEORGIEVSKAYA A B, RAEVSKY V A. Estimation of spectral characteristics of particles ejected from the free surfaces of metals and liquids under a shock wave effect [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2012, 1426: 1007–1010.
- [70] HE A M, LIU J, LIU C, et al. Numerical and theoretical investigation of jet formation in elastic-plastic solids [J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 124(18): 185902.
- [71] GRADY D E. The spall strength of condensed matter [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1988, 36(3): 353–384.
- [72] 石艺娜, 秦承森. 金属射流失稳断裂的理论分析 [J]. *力学学报*, 2009, 41(3): 361–369.
SHI Y N, QIN C S. Instability and breakup of stretching metallic jets [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2009, 41(3): 361–369.

- [73] DE RESSÉGUIER T, SIGNOR L, DRAGONR A, et al. Experimental investigation of liquid spall in laser shock-loaded tin [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(1): 013506.
- [74] 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.
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.
- [75] DIMONTE G, TERRONES G, CHERNE F J, et al. Use of Richtmyer-Meshkov instability to infer yield stress at high energy densities [J]. *Physical Review Letters*, 2011, 107(26): 264502.

Brief Review of Research Progress on Numerical Simulation of Ejection Phenomena

SHAO Jianli¹, HE Anmin², WANG Pei²

(1. *Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;*

2. Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China)

Abstract: In this paper, the research progress on numerical simulation of ejection phenomena at home and abroad is briefly reviewed and summarized. Firstly, the characteristics of ejection phenomena and its physical connotation are explained. Then, the molecular dynamics studies and continuum mechanics studies on the two main ejection mechanisms, microjet and microspallation, are respectively summarized. At last, some difficult problems in the numerical study of ejection phenomena are summarized. We hope this paper can provide useful reference for related numerical simulation or modeling research.

Keywords: ejection; shock; molecular dynamics; continuum mechanics