文章编号: 1006-9941(2010)02-0229-07

# 含能材料的损伤本构模型研究进展

李俊玲,卢芳云,赵鹏铎,陈 荣 (国防科技大学理学院,湖南长沙410073)

als.org.cn 摘 要:主要从宏观力学现象和微观统计力学两个角度介绍了国内外含能材料损伤力学模型的发展现状。通过比较各模型的描 述观点和应用范围,认为需要建立多尺度分析模型,系统研究各种形式加载条件下含能材料的损伤演化规律及关联性,才能建立更 合理的本构模型描述含能材料的力学行为。

关键词:固体力学;含能材料;本构模型;连续损伤力学;微观统计损伤力学;多尺度分析 文献标识码: A 🔊

中图分类号: TJ55; O34

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2010.02.024

## 1 引 言

在实际的弹药生产、运输和发射过程中,炸药都会 经历复杂的力学过程,材料会发生变形,产生新的损伤, 可能引起材料在低于冲击起爆(SDT)阈值的情况下意 外起爆。早在1980年就已经发现,即使是很弱的冲击 波也会致使固体推进剂爆炸,这些轻微的多维力学冲击 引起的爆炸被叫做非冲击点火<sup>[1]</sup>。对这种现象的研究 主要集中在决定爆或不爆的实验条件以及冲击速度,很 难揭示根本的基于微观力学响应的点火原因。许多学 者普遍认为非冲击点火发生在材料中孤立的高温区域 即热点,这些区域主要是应力或冲击波与材料缺陷的相 互作用形成的。所以热点的形成依赖于材料的力学、热 学和化学特性。但关于产生热点的主要机制还没有达 成一致。目前主要研究的微观机制有粘性加热、局部塑 性功、粒子之间的摩擦、气体绝热升温导致的空穴坍塌、 内剪切应力、冲击波在间断面上的相互作用。这些机制 在一定条件下都可能形成热点。

含能材料的安全性是目前的一个研究热点,许多 学者都致力于研究能恰当描述其在复杂力学条件下的 响应。含能材料的种类不同,所承受的力学环境不同, 损伤模式也不一样,因此描述其损伤演化过程的本构 模型形式各异。本文比较总结了各种含能材料本构模 型的优缺点,并给出了如何建立更能揭示材料物理本

收稿日期: 2009-05-18; 修回日期: 2009-07-23

基金项目:国家自然科学基金(10872215,10672177)

作者简介:李俊玲(1984-),女,博士研究生,从事材料动态力学性能 研究。e-mail: jl\_lee@ nudt. edu. cn

质,模型参数较简单的含损伤本构模型的建议和方法。

#### 2 连续损伤演化模型

早在20世纪50年代中期,连续损伤力学开始发 展起来。作为工程中的实用工具,它只是采用力学特 性的平均变量来作为损伤度,比如,杨氏模量的减少。 一般连续损伤力学包括两部分:演化律和临界损伤。 Kachanov<sup>[2]</sup>引入了损伤变量 D, D=0 和 D=1 分别 代表固体的完好和破坏状态。演化律为[2]

$$\dot{D} = \frac{K(\sigma)}{(1-D)^{\gamma}} \tag{1}$$

式中, $\gamma$ 是未定的量。应力为 $\sigma = \sigma_s(1-D), \sigma_s \sigma_s$ 分别 代表公称应力和完好基体的应力。临界损伤 D。通常 取经验临界损伤并作为材料特性来使用。连续损伤模 型的一般形式为<sup>[3]</sup>

$$\overline{\varepsilon} = S(D) : \overline{\sigma} + \overline{\varepsilon}^{p}$$
(2)

式中,短横线表示各量在代表体积单元上取平均,上标 p代表塑性, S为有效柔度张量。假设各场的变化率 也都是连续的,则应变率的形式为

$$\dot{\overline{\varepsilon}} = \overline{S}_{:}\dot{\overline{\sigma}} + \dot{\overline{S}}_{:}\overline{\overline{\sigma}} + \dot{\overline{\varepsilon}}^{p} = \dot{\overline{\varepsilon}}^{e} + \dot{\overline{\varepsilon}}^{d} + \dot{\overline{\varepsilon}}^{p},$$
$$\dot{\overline{\varepsilon}}^{d} = \dot{\overline{S}}(D, \dot{D})_{:}\overline{\overline{\sigma}}$$
(3)

式中,上标 e、d 和 p 分别代表弹性、损伤和塑性变形, 假设损伤势能存在,有效柔度系数和带损伤的应变就 表示为

$$\overline{S}_{ijmn} = \dot{\lambda} \frac{\partial \Omega(\Gamma, S)}{\partial \Gamma_{ijmn}}, \ \dot{\overline{\varepsilon}}_{ij}^{d} = \dot{\lambda} \frac{\partial \Omega(\sigma, \overline{\varepsilon}^{d})}{\partial \overline{\sigma}_{ij}}$$
(4)

式中,2 $\Gamma_{ijmn}$  =  $\overline{\sigma}_{ij}\overline{\sigma}_{mn}$ 为与有效柔度模量变化联系的热

229

含能材料

动力, $\lambda$ 为损伤度的变化率。

Martin 和 Leckie<sup>[4]</sup>, Hayburat 和 Leckie<sup>[5]</sup>给出的 多轴应力条件下均匀分布和非均匀损伤演化方程,但 没有考虑应变的影响。Lee<sup>[6]</sup>等针对非均质材料,给 出了常应力条件下的局部非均匀蠕变损伤模型,但只能 用于单轴拉伸的情况。Franklin<sup>[7]</sup>改进了Mori-Tanaka 模型来预测粒子复合材料的非线性力学行为,并结合 复合材料的实验数据进行分析,表明变形过程中粒子 发生脱粘但不会完全分离,并且粒子-基体间粘着控制 着材料的宏观力学特性。Okada<sup>[8]</sup>采用了分离的各向 同性/偏斜损伤模型并加入 FEM 和 s-FEM 数值计算中、? 分析粒子增强复合材料的损伤力学行为。他们假设, 相对于剪切应力,空洞的生长对静水压的作用更为敏 感。Schapery<sup>[9]</sup>利用热力学统计力学的基本思想分析 了粘弹介质的热力学行为、断裂以及折射现象,建立了 非线性本构关系。Schapery<sup>[10]</sup>采用非平衡热动力学, 演化理论及各种合理的简化,建立了包含损伤的非线 性粘弹性和粘塑性本构方程。

以上模型大都针对粒子增强复合材料,与含能材 料在结构上有一定的可比性,值得借鉴和参考。如果 利用上述理论分析含能材料,则应更加注重晶体、粘接 剂以及其它相各自的力学性能以及相互作用点。阳建 红<sup>[11]</sup>在研究 HTPB 复合固体推进剂时,就改进了 Schapery 的非线性模型并拟合出实验参数,他认为该 模型参数拟合实验十分复杂,参数的确定具有人为主 观性。下面重点介绍几个含能材料损伤的演化发展本 构模型。

### 2.1 高能炸药中粒子和基体界面的粘着律

粒子/基体的界面对高能炸药的宏观性能影响很大,局部界面的突然脱粘能引起热点的形成,便粒子在低强度加载时引爆。粘着区域模型假设法向(切向) 牵引和微裂纹的开裂(滑移)位移之间的关系,以此来 获得粒子/基体界面的脱粘过程。然而大多数模型的 建立都是基于线性粘着律的。非零的法向牵引力 $\sigma^{int}$ 导致界面法向位移(开裂位移[ $u_r$ ])的不连续。 Tan<sup>[12]</sup>认为没有剪切牵引力,粘着律就简化为 $\sigma^{int}$ 和 $u_r$ 的关系,可分为三个阶段描述,如图1所示。  $\sigma^{int} = k_{\sigma}[u_r], [u_r] < \sigma_{max}/k_{\sigma}, stage 1$  $\sigma^{int} = (1 + \tilde{k}_{\sigma}/k_{\sigma})\sigma_{max} - \tilde{k}_{\sigma}[u_r],$ 

$$\sigma^{\text{int}} = 0$$
,  $[u_r] > (1/\tilde{k}_{\sigma} + 1/k_{\sigma})\sigma_{\text{max}}$ , stage 3 (5)

参数只有  $k_{\sigma}$ ,粘着强度  $\sigma_{max}$ 和软化模量  $\hat{k}_{\sigma}$ ,需要由实验结果来决定,现作简单的介绍。





Fig. 1 The cohesive law for the particle/matrix interfaces in PBX9501<sup>[12]</sup>

要得到  $k_{\sigma}$ ,可考虑复合材料的粒子都是球形的且 特性相同,只是半径不同,用  $a_N$ (N = 1, 2, ...)表示。 Wu<sup>[13]</sup>和 Tan<sup>[14]</sup>利用 Mori-Tanaka 方法来决定材料的 线弹性体积模量  $K 与 \alpha_N$  的关系。 $\alpha_N$  是第一阶段中 半径为  $a_N$  的粒子的平均应力与基体的平均应力之比 值,它与交界面的线性模量  $k_{\sigma}$  有关。因此,通过实验 测得线弹性体积模量,然后拟合得出  $k_{\sigma}$ 。

复合材料的宏观应力  $\overline{\sigma}$  为粒子和基体的体积平均应力,根据 Mori-Tanaka 方法,半径为  $a_N$  的粒子的 平均应力  $\sigma_N$  与基体的平均应力  $\sigma^m$  相关。而对于 PBX9501, $\sigma_{max} = \overline{\sigma}_s$ 。

当界面脱粘路径上的粒子/基体界面达到第三阶段时,外面区域的界面始终处于第一阶段,此时宏观应力 $\overline{\sigma}$ 减小到0,正引力也消失了,因为力平衡,外面区域的界面引力也为0。此时外部区域的粒子/基体界面的开裂位移也为0,即 $u_r = \sigma^{int}/k_{\sigma} = 0$ 。宏观应力为0对应

宏观裂纹的扩展,此时用宏观粘着能分析得到 $\hat{k}_{\sigma}$ 。

### 2.2 颗粒复合材料带损伤发展的三维粘弹本构模型

在 Ha 和 Schapery<sup>[15]</sup>的有限元方法中,实际的边 界位移场转化为虚拟位移场,通过估计卷积值将真实 和虚拟的位移场联系起来。但这种处理方法适用于弹 性体,不能用于非线性粘弹性体。Hinterhoelze 和 Schapery<sup>[16]</sup>进一步发展了能够描述粘弹性固体在不 同应变率下的整体和局部变量的三维本构方程。他们 假设:(1)未损伤的材料是各向同性的,带有损伤的 复合材料是局部横向同性的。带损伤区域的描述坐标 轴根据当地的最大主应力的方向来选择;(2)对具有 损伤数量固定的材料遵循线性粘弹性。基于粘弹性断 裂力学和弹-粘弹性对应原则,可用虚拟的应变能密度 *W<sup>®</sup>* 以及虚拟应变与真实应变的关系推出主应力的表达式为<sup>[16]</sup>:

$$\sigma_{i} = \frac{\partial W^{\kappa}}{\partial \varepsilon_{i}^{R}} (i = 1, 2, 3)$$
(6)

应力可以具体表达为弹性模量和虚拟应变的表达 式。弹性模量由  $C_{ij}$ 来决定。 $C_{ij}$ 是两个损伤变量  $S_1$  和  $S_2$  的函数<sup>[15]</sup>。 $S_1$  表征空洞生长效应,  $S_2$  描述剪切形 式的损伤。

损伤演化方程就可以定义为<sup>[16]</sup>:

 $\frac{\mathrm{d}S_1}{\mathrm{d}\xi} = \left(-\frac{\partial W^R}{\partial S_1}\right)^{\omega_1}, \frac{\mathrm{d}S_2}{\mathrm{d}\xi} = \left(-\frac{\partial W^R}{\partial S_2}\right)^{\omega_2} S_1(0) = S_2(0) \quad (7)$  $\vec{\mathrm{x}} + \mathbf{\xi} \, \mathbf{5} \, \mathbf{M} \, \mathbf{K} \, \mathbf{H} \, \mathbf{H} \, \mathbf{\omega}_1 \, \mathbf{1} \, \mathbf{\omega}_2 \, \mathbf{5} \, \mathbf{H} \, \mathbf{H} \, \mathbf{S} \, \mathbf{S$ 

用该模型进行有限元数值模拟得到材料的应力和 表面应变预测与实验数据吻合得较好。但该模型没有 考虑破坏准则和材料的微观结构效应,采用的是几何 线性理论,忽略了几何非线性的影响。该模型比较适 合用于含粘接剂较多的浇铸炸药。

### 2.3 ZWT 模型的改进与应用

李英雷等<sup>[17]</sup>研究 TATB 炸药在冲击压缩下力学 响应及损伤演化中指出,TATB 炸药为含有初始损伤 的非线性粘弹性体,可利用损伤型 ZWT 进行描述。 朱-王-唐(ZWT)模型为唐志平等提出的用于冲击加载 下的非线性粘弹本构模型<sup>[18]</sup>。李英雷考虑到 TATB 的初始损伤,将具体损伤演化方程改为<sup>[17]</sup>:

$$\sigma = (1 - D) \left[ E_0 \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3 + E_1 \int_0^t \dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{t - \tau}{\theta_1}\right) \right] d\tau + E_2 \int_0^t \dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{t - \tau}{\theta_2}\right) d\tau \left[ (8) \right] D = D_0 \dot{\varepsilon}^{\delta^{-1}} \varepsilon \qquad 0 \le D \le 1$$
(9)

式中,δ为材料参数,表征应变率对损伤的影响;D为 损伤因子。损伤型 ZWT 模型采用唯象损伤理论,参 数虽多但拟合起来比较简单。对炸药来讲,目前在 10<sup>2</sup>~10<sup>3</sup> 应变率范围,该模型的拟合结果曲线与实验 曲线吻合得较好,但还需要对其改进以适用于更高应 变率条件。

### 3 微观损伤演化模型

从上文可以看出,连续损伤模型从本质上讲属于 一种经验描述。微观力学损伤模型的基本思想是对变 形固体的单个空洞的应力分析外推到空洞阵列以获得 平均本构方程。微空洞/裂纹的成核、生长和结合导致 材料发生断裂,成核过程在整个损伤演化发展阶段的 影响较小,生长过程是最重要的阶段,结合过程只在损 伤演化的后期起主要作用,持续时间短并且可以直接 观测到。为了简化模型,许多学者都采用初始损伤和 临界损伤代替成核和聚合过程。所以,针对普通惰性 材料,许多模型实质上主要关注于微空洞/裂纹的生长 过程,一旦损伤达到临界值,微空洞/裂纹开始结合。 而这些模型的思想和精髓对分析含能材料的微观损伤 也尤为重要。

Rice 和 Tracey<sup>[19]</sup>在研究延性裂纹导致的断裂过 程中,分析了无限介质中的一个孤立的圆柱形空洞和 一个球形空洞的生长过程,给出了基于无限基体的空 洞生长模型。当无限基体的主应变力很大,可忽略空 洞的变形,只考虑空洞的球形对称膨胀。Johnson<sup>[20]</sup> 应用静态和动态空洞坍塌之间的联系,发展了空洞生 长模型。

Curran 等<sup>[21-22]</sup>提出了成核生长模型(NAG)。 该模型包含微裂纹成核、生长、结合甚至破碎。他们假 设微损伤在整个演化过程中都遵循指数分布。该模型 中的微损伤的成核率和粘性生长率都只是应变相关, 与时间无关。该模型具有很好的普遍性,包括了像孔 洞和空洞密度等多个变量的静态分布。但该模型基于 统计观察,它需要的一些数值参数很难得到。对脆性 断裂,裂纹成核与生长的思想和延性断裂的情况相似。 Seaman<sup>[23]</sup>基于实验观察,认为裂纹生长很慢,以裂纹 的长度和裂纹方向的角度来定义,需要在球坐标下并 划分为各单元进行描述。

Bai 等<sup>[24-25]</sup>研究了平面冲击加载下损伤的发展 时提出了一系列统计微观损伤力学理论,并用裂纹半 径 c 来表征空洞的尺寸效应,这是由于成核后的微空 洞体积很小,适宜构造参数半径。他们提出,微损伤的 分布函数一般服从威布尔函数<sup>[26]</sup>。Feng<sup>[27]</sup>等基于白 以龙<sup>[24]</sup>提出的微观损伤统计模型并结合能量模型,给 出了冲击断裂时材料损伤演化的方程。

除了采用统计分布描述微缺陷的空间非均匀性, 也有采用在本构模型中加入分布公式。Bogdanoff<sup>[28]</sup> 就在 Markovian 处理的基础上植入了损伤累积 B-模 型。刑修三<sup>[29]</sup>用 Fokker-Planck 方程来研究微裂纹的 分布并用 Griffith 的断裂准则来预测断裂可能性。

以上损伤模型用于描述含能材料含损伤本构关系 时需要考虑材料的特殊性质,比如压装型炸药表现为很 强烈的脆性,微裂纹一旦成核,会迅速发展成为宏观裂 纹致使材料破坏。并且在实验中还观察到微裂纹不仅 会沿加载方向扩展,还出现垂直于加载方向的次生微裂 纹。由于该过程往往处于损伤晚期,又比较难处理,许 多模型往往忽略微裂纹的取向问题。但实际上材料的 受力情况很复杂,导致材料中产生的并非理想的平行微 裂纹群等。这就需要冻结加载后的试样并进行细观观 察,捕捉微裂纹的形成发展过程,总结分析晶体、粘接剂 等力学性能对破坏机制的影响规律,结合上述经典模型 的思想,建立出适于含能材料的含损伤本构模型。下面 详细给出用于含能材料的微观分析损伤模型。

#### 3.1 visco-SCRAM 本构模型

Diens<sup>[30]</sup>进行的一阶精度分析表明,大量潜热的 产生来源于剪切裂纹表面摩擦力的作用,他提出了统 计裂纹力学模型(SCRAM)并证实了该模型里的摩擦 加热效应可以产生点火<sup>[31]</sup>。SCRAM本构模型是处理 脆性材料的大变形和裂纹的微观方法。

Bennett<sup>[1]</sup>等采用了 n 个麦克斯韦体的粘弹模型 建立了粘弹性、各向异性的 SCRAM 点火模型,模拟 PBX-9501 的包含非冲击点火的三维力学响应。若裂 纹生长速率依赖于应力强度,则裂纹的演化可以用式 (10)描述<sup>[1]</sup>

$$c = v_{\max} \left(\frac{K}{K_{1}}\right)^{m} \qquad K < K'$$

$$c = v_{\max} \left(1 - \frac{K_{0}}{K}\right)^{2} \qquad K \ge K'$$

$$K' = K_{0} \sqrt{1 + \left(\frac{2}{m}\right)}, \quad K_{1} = K_{0} \sqrt{1 + \left(\frac{2}{m}\right)} \left(1 + \frac{m}{2}\right)^{\frac{1}{m}} \quad (10)$$

其中, K 为体积模量, 对于 PBX9501, m = 10。

在 SCRAM 模型中,HMX 材料裂纹的方向遵循 一定的统计分布。如果剪切应力超过了摩擦力,相 邻的裂纹面就会产生滑移并做功产生热。修正后的 Frank-Kamenetskii 公式表示在裂面附近一维热转化 的情况<sup>[32]</sup>。

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( k_i \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \rho_i \Delta H Z e^{\frac{\ell}{RT}} + \mu p \frac{\partial v_x}{\partial y} = \rho_i C_i \frac{\partial T}{\partial t},$$

$$I_i \ge y \ge 0 \tag{11}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( k_i \frac{\partial T}{\partial t} \right) + e^{\frac{\lambda}{2T}} e^{\frac{\ell}{2T}} = e^{-\frac{\lambda}{2T}} e^{-\frac{\lambda}{2T}} \tag{12}$$

$$\frac{\partial}{\partial y}\left(k_s\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \rho_s \Delta HZ e^{\frac{1}{kT}} = \rho_s C_s\frac{\partial T}{\partial t}$$
(12)

 $I_f$ 为热点的长度,两个方程中,第一项为从热点开始的 热传导方程,第二项为每单位体积产生的化学能,右边 为热点影响区储存的热。其中,T为绝对温度, $k_{i(i=ids)}$ 为材料的热导系数, $C_{i(i=ids)}$ 为材料的热容量, $\rho_{i(i=ids)}$ 为质量密度,ΔH 为爆炸热,Z 为指数前因子,E 为 Arrhenius活化能,R 为气体常数,t 为时间。

假设每个单元的微观裂纹的方向总是与最大主应 变率方向垂直,而最大主应变率和其方向可以从应变 率张量中获得。那么可在垂直于上述方向的平面上找 到偏斜应力。于是可以检测静摩擦系数和压强(如果 p为正,表明裂纹已经开裂,无热产生)的乘积值 $\mu_s p$ 。 若该平面的最大剪应力超过了该值,裂纹开始滑移,产 热的速率为 $\mu p \partial v_x / \partial y, \mu$ 为动摩擦系数。

### 3.2 累积损伤热点模型

Cook<sup>[33]</sup>的累积损伤热点模型主要描述了可爆炸 药晶体的颗粒燃烧过程。他认为损伤包括剪切、塑性变 形及粒子与粘接剂的脱湿和微空洞/裂纹变形。在空洞 坍塌模型中,气体填充了球形空洞,并被一恒定质量薄 球壳包围。炸药反应后会形成壳状的物质,质量就从球 体转换到薄球壳再转换为气体产物,所以用球壳的变形 程度来建立剪切模型。这里假设:体积热效应以外的 形式不会加热球壳;压缩波能量的减少相对总能量来 说可忽略不计。壳具有球对称特性,其形状用内外半径 描述。描述壳的参数有: $\eta_{\sigma}$ 为孔壳的质量分数, $\eta_{\rho}$ 为 球形空洞的质量分数, $r_{o}$ 为实时孔洞半径, $\varphi$ 为实时孔 隙率。Cook 只给出了剪切模型中迭代过程的最初形 式,该模型不仅严格适用于低应变率阶段,若配以高应 变率实验数据,也可以作为一般的热点模型。

### 3.3 NAG 模型的发展应用

Seaman 和 Curran<sup>[34]</sup> 建立的 NAG 模型经过不断 完善和改进,也逐渐用于冲击作用下固体推进剂和炸药 的断裂与破碎模拟。赵锋等<sup>[35]</sup> 研究 JO9519 的冲击断 裂和破碎时对 Seaman 等提出的 NAG 模型进行了简 化,建立了 JO9519 的脆性损伤模型,用孔洞模型描述。

固体推进剂在高应变率下表现为脆性断裂。黄风雷 等<sup>[36]</sup>在 Seaman 等<sup>[21-22]</sup>及 Perzyna<sup>[37]</sup>的微裂纹损伤模 型基础上考虑了压缩波对微裂纹成核的影响而建立了适 用于固体推进剂动态断裂的微裂纹脆性损伤模型。

### 3.4 含化学反应损伤演化模型简介

含能材料在外载作用下的响应很复杂,涉及力-热-化学反应的相互耦合。除了前面的 visco-SCRAM 模型可以闭合裂纹剪切作用下摩擦生热产生热点进而 点火和燃烧,还有 Matheson 等<sup>[38-39]</sup>首先提出的损伤 与化学反应耦合模型(CDAR),可对 SDT、DDT、XDT 和热爆炸过程进行模拟<sup>[40-41]</sup>,以及 Demol 等<sup>[42]</sup>建立 的冲击波诱导空洞燃烧,最后晶粒表面燃烧的 CHARME模型,适用于压制炸药的反应模型。

#### 4 多尺度损伤本构模型

含能材料损伤发展过程牵涉到多个主导层次的关

联问题,是一个多尺度问题。从微观到宏观的演化各 个尺度关心的损伤演化问题都涉及非线性相互作 用<sup>[26,43]</sup>。而介观结构(粒子、微空洞、微裂纹)在演化 中起到了很重要的作用。在外加载条件下固体的损伤 和破坏通常都远离平衡态,并且在各个时间尺度存在 各种各样的介观动能。大量微裂纹的聚集效应控制着 损伤演化,而不是哪一个单个裂纹。尺度效应是反应 材料宏微观跨层次的核心科学问题,常源于不同的物 理学机制,这既赋予了尺度效应的复杂性,又蕴藏了丰 富的研究内容。多尺度力学的可能方式有:

(1)非平衡统计力学。在非平衡动力学系统,分 布函数不是一成不变的,非平衡统计力学和热力学将 在联系微观到宏观演化行为起到重要作用。

(2)耦合多尺度方程并同时求解。将宏观连续介 质力学与微观势能方程的变换来形成一个整体并非易 事,需要建立必要的估算。

(3)基于原子分子相互作用的多尺度算法,比如 分子动力学。需要扩大计算规模,就需要将原子模拟 与连续介质原场相耦合。

Bai 等人<sup>[44]</sup>在研究材料的层裂过程中提出了介 观统计力学模型。定义的损伤变量为

$$D(t,x) = \int_0^\infty n(t,x,c) \cdot \tau \cdot dc$$
(13)

n(t,x,c)为常应力加载下的微损伤数密度的演化函数, c为微损伤的尺寸,τ单个尺寸为 c 的破坏体积。在微 损伤演化问题中,微损伤的总数不是一成不变的,采用 数密度演化函数能充分反应微损伤演化的非平衡特性。

他们引入动态损伤函数 f 作为桥梁将微观与宏观 损伤联系起来,它包含了微损伤成核与生长对宏观连 续损伤演化发展的影响。从应用的角度讲,必须将微 损伤数密度与宏观应力、应变和运动场联立起来求解, 才有实际意义。动态损伤函数的形式为<sup>[44]</sup>

$$f = \int_{0}^{\infty} n_{N}(c;\sigma) \cdot \tau \cdot dc + \int_{0}^{\infty} n(t,Y,c;\sigma) \cdot A(t,c;\sigma) \cdot \tau' \cdot dc$$
(14)  
$$\tau' = d\tau/dc, A 为尺寸为 c 的微损伤的平均生长率, 它$$

是体积 V 的函数。

在应力波导致宏观失效的多尺度问题中,蕴含了 三个速率过程:宏观波动、微损伤的演化成核和扩展 过程,它们分别具有三个不同的时间特征尺度,分别为  $t_i, t_N$ 和 $t_V$ 。德博拉数 $De^*$ 为 $t_V$ 与 $t_i$ 的比值,它是应 力波引起微损伤演化导致失效过程的一个特征表征, 并宏观上控制这类跨尺度耦合问题的关键。而内禀德 博拉数  $D^*(D^* = t_v/t_N)$ 反映了微损伤成核和扩展两 过程的速率相互竞争,是损伤局部化的表征特征,在失 效预测上有重要的意义。

要提高和发展含能材料含损伤的本构模型,只有 考虑损伤发展过程的多尺度及相互耦合的问题,才有 希望真正揭示各种非线性源的作用机制。介观统计力 学模型实现了跨尺度的封闭和特征表征,为今后研究 含能材料的含损伤本构模型提供了较好的发展思路。 这个问题的关键是找到一个合适的微损伤描述和如何 根据细观微损伤的动理学机理来确定动态损伤函数。 这必须针对含能材料多尺度问题的具体特点来具体分 析跨尺度耦合效应的物理机理。介观统计模型为了方 程组的求解对模型做了近似表述,忽略了微损伤的许 多细节描述。但对包含两相甚至更多相的含能材料, 微损伤的取向问题、成核机制以及扩展路径等都对材 料宏观失效起着重要的作用,并存在更为复杂的耦合 问题。除了时间特征以外的表征参数,还需要建立反 映材料特性以及空间特征的表征参数。

当然,真正理解材料的损伤特性,还需结合纳观损伤的表征。比如,在损伤累积导致材料宏观断裂的过程中,裂纹顶端的原子团作为一个动力学系统,从确定性运动到随机或部分随机运动的规律以及它们的运动形态与材料韧脆转变行为的关系等等。在多尺度分析含能材料力学行为的研究初期,我们可以适当简化某些问题,先获得能够初步反映材料响应的宏观-细观结合描述的损伤模型与物理机制,然后再深入到纳观层次或许才是一个理想的方法与路径。

要进一步研究含能材料的损伤发展,就必需对影响含能材料非线性粘弹性变形和破坏行为的分子和微观机制有更好地理解,这就要求将力学和材料学科真正高度结合起来。实验上需要揭示多轴应力历史(应力应变主轴的旋转)、瞬时和循环温度效应、增塑剂的温度等对非线性本构和破坏模式的影响,并对理论模型预测临界值进行确认。分析损伤分布及软化机制的影响,尤其是应力集中和应力梯度及尺寸效应。

随着各种测试技术,比如高速、超高速摄影技术, 扫描电镜、原子力显微观察技术等相继出现并迅速发展,有些实验已经能够逐步揭示某些微观损伤现象。 许多参数逐步量化,为更为复杂的方程组提供了求解 的可能性。将微观测试技术与宏观测试技术统一结 合,有望得到含能材料具有物理本质和实用性很强的 损伤本构模型。

## 5 总 结

本文针对含能材料,给出了一些较为典型的含损 伤的本构模型,希望能给相关研究提供一点思路和参 考。可以看出,虽然这些模型都是为了描述或揭示含 能材料在不同载荷作用下的力学行为,预测损伤的发 展以及热点的产生,但建立这些模型的出发点以及方 法都不尽相同,它们的应用范围也极为有限,实验验证 也比较单一。

在实验室真实模拟含能材料服役过程的各种受力 环境是很困难的,这需要系统研究不同力学条件下含 能材料的损伤演化规律,探索各加载条件下力学响应 的关联性。结合微观分析,获取更为详细的统计特征 (热力学状态)和损伤演化导致分布的变化,将统计模 型与计算模拟相结合,争取找到宏观力学响应与微观 机制相关联的桥梁,建立合理的本构模型描述含能材 料的力学行为是本学科的研究方向。

#### 参考文献:

- [1] Bennett J G, Haberman K S, Johnson J N, et al. A constitutive model for the non-shock ignition and mechanical response of high explosives[J]. J Mech Phys Solids, 1998, 46 (12): 2303 – 2322.
- [2] Kachanov L M. Inreoduction to Continuum Damage Mechanics[M]. The Netherlands: Martinus Nijhoff, 1986.
- [3] Krajcinovic D. Damage mechanics accomplishments, trends and needs[J]. International Journal of Solids and Structures, 2000, 37: 267 – 277.
- [4] Martin J B, Leckie F A. On the creep rupture of structure [J]. J Mech Phys Solids, 1972, 20: 223 – 228.
- [5] Hayhurst D R, Leckie F A. The effect of creep constitutive and damage relationships upon the rupture time of a solid circular torsion bar[J]. J Mech Phys Solids, 1972, 21: 431 – 446.
- [6] Lee C, Cozzarelli F A. Strain-dependent creep damage in random inhomogeneous materials[R]. AD A097164, 1980: 121.
- [7] Wong F C, Ait-Kadi A. Predictive capability of a new Mori-Tanaka micromechanical model for particulate composites [R]. AIAA 98-1861. 1998: 1394 – 1404.
- [8] Okada H. Numerical investigation for microstructure effects on the crack growth behavior of particulate composite materials [R]. FA520904P0397, 2006.
- [9] Schapery R A. Application of thermodynamics to thermomechanics, fracture and birefringent phenomena in viscoelastic media [J]. *Journal of Applied Physics*, 1964, 33(5): 1451 – 1465.
- [10] Schapery R A. Nonlinear viscoelastic and viscoplastic constitutive equations with growing damage[J]. *International Journal of Fracture*, 1999, 97: 33 – 66.
- [11] 阳建红. HTPB 复合固体推进剂损伤的实验和理论研究[D]. 西 安: 第二炮兵工程学院,1999.
- [12] Tan H, Liu C, Huang Y, et al. The cohesive law for the particle/ matrix interfaces in high explosives[J]. *Journal of the Mechanics*

and Physics of Solids, 2005, 53: 1892 – 1917.

- [13] Wu Y, Ling Z, Dong Z. Stress-strain fields and the effectiveness shear properties for three -phase composites with imperfect interface[J]. Int J Solids Struct, 1999, 37: 1275 – 1292.
- [14] Tan H, Huang Y, Liu C, et al. The Mori-Tanaka method for composite materials with nonlinear interface debonding [J]. Int J Plasticity, 2005.
- [15] Ha K, Schapery R A. A three-dimensional viscoelastic constitutive model for particulate composites with growing damage and its experimental validation[J]. *Internat J Solids Struct*, 1998, 35: 3497 – 3517.
- [16] Hinterhoelzl R M, Schapery R A. FEM implementation of a threedimensional viscoelastic constitutive model for particulate composites with damage growth[J]. Mechanics of Time-Dependent Materials, 2004, 8: 65 – 94.
- [17] 李英雷,李大红,胡时胜. TATB 钝感炸药本构的实验研究[J]. 爆 炸与冲击,1999,19(4):355-359.
  LI Ying-lei,LI Da-hong,HU Shi-sheng. An experimental study on constitutive relation of TATB explosive[J]. *Explosion and Shock Waves*,1999,19(4):355-359.
- [18] 唐志平. 高应变率下环氧树脂的力学性能研究[D]. 合肥:中国 科技大学,1981.
- [19] Rice J R, Tracery D M. On the ductile enlargement of voids in triaxial stress fields[J]. J Mech Phys Solids, 1969, 17(3): 201 – 217.
- [20] Johnson J N. Dynamic fracture and spallation[J]. J Appl Phys, 1981,52(4): 2812 – 2825.
- [21] Seaman L, Curran D R, Shockey D A. Compitational models for ductile and brittle fracture[J]. J Appl Phys, 1976, 47(11): 4814 - 4824.
- [22] Curran D R, Seaman L, Shockey D A. Dyanmic failure of solids[J]. Phys Rep, 1987, 147: 254 388.
- [23] Seaman L, Curran D R, Shockey D A. Computational models for ductile and brittle fracture[J]. *Journal of Applied Physics*, 1976, 47(11): 4814 - 4826.
- [24] 白以龙,柯孚久,夏蒙棼.固体中微裂纹系统统计演化的基本描述[J].力学进展,1991,23(3):290-298.
  - BAI Yi-long, KE Fu-jiu, XIA Meng-feng. Formulation of statistical evolution of microcracks in solids[J]. *Advances in Mechanics*, 1991,23(3): 290 298.
- [25] Bai Y L,Xia M F,Ke F J, et al. Statistical microdamage mechanics and damage field evolution [J]. Thero Appl Fract Mech, 2001, 37: 1-10.
- [26] Bai Y L,Xia M F,Ke F J,et al. Closed trans-scale statistical microdamage mechanics [J]. Acta Mechanica Sinica, 2002, 18 (1): 1-17.
- [27] Feng J, Jing F, Zhang G. Dynamic ductile fragmentation and the damage function model[J]. J Appl Phys, 1997, 81(6): 4.
- [28] Bondonaff J L. Probabilistic Models of Cumulative Damage[M]. New York: Wiley and Sons, 1985.
- [29] 邢修三. 脆性断裂的微观机理和非平衡统计特性[J]. 力学进展, 1986,16:495-510.
  XING Xiu-san. The microscopic mechanism and noneequilibrium statistical nature of brittle fracture[J]. Advances in Mechanics, 1986,16:495-510.
- [30] Dienes J K. Frictional hot-spots and propellant sensitivity [J]. *Proc Mat Res Soc Symp*, 1984, 24: 373 - 381.
- [31] Dienes J K. A unified theory of flow, hot spot, and fragmentation with an application to explosive sensitivity[M]. In high-pressure

含能材料

shock compression of solids Ⅱ. D. Lee. ed. 1996.

- [32] Frank-Kamenetakii A A. On the mathematical theory of thermal explosions[J]. *Acta Physicochimica URSS*, 1942, 16: 357 361.
- [33] Cook M D, Haskins P J, Stennett C, et al. Cumulative damage hotspot model for use with arrhenius based ignition and growth model [ C ] // 12th International Detonation Symposium. California. 2002.
- [34] Salvetat B, Gueryj F. Visulizaition and modeling of delayed detonation in the card cap test[C] // 10th International Symposium on Detonation. 1993: 7.
- [35] 赵锋,孙承纬,文尚刚,等. 飞片撞击下 JO-9159 炸药的脆性损伤
  [J]. 爆炸与冲击,2001,21(2):121-125.
  ZHAO Feng, SUN Cheng-wei, WEN Shang-gang, et al. Brittle fracture of high explosive JO-9159 under plate impact loading.
  [J]. Explosion and Shock Waves,2001,21(2):121-125.
- [36]黄风雷,王泽平.复合固体推进剂动态断裂研究[J]. 兵工学报, 1995(2):47-50.
  HUANG Feng-lei,WANG Ze-ping. Dynamic fracture of composite solid propellant[J]. Acta Armamentrii,1995(2):47-50.
- [37] Perzyna P. Constitutive modeling for brittle dynamic fracture in dissipative solids[J]. Ach Mech, 1986, 138(5~6).
- [38] Matheson E R, Rosenberg J T. A mechanistic study of delayed

detonation in impact damaged solid rocket propellant[J]. *Shock Compression of Condensed Matter*, 2001 : 464 – 467.

- [39] Matheson E R, Drumheller D S, Baer M R. A coupled damage and reaction model for simulating ernergetic material response to impact hazards [J]. Shock Compression of Condensed Matter, 1999: 651-654.
- [40] Baer M R, Hertel E S, Bell R L. Multidimensional DDT modeling of ernergetic materials [J]. Shock Compression of Condensed Matter, 1995: 433-436.
- [41] Drumheller D S. The role of distention in reacting porous solids
   [J]. Shock Compression of Condensed Matter, 1999: 133 135.
- [42] Demol G, Goutelle J G, Mazel P. CHARME: A reactive model for pressed explosives using pore and gain size distribution as parameters[J]. *Shock Compression of Condensed Matter*, 1997: 353-356.
- [43] Bai Y L,Wang H Y,Xia M F,et al. Trans-scale mechanics: Looking for the missing links between continuum and micro/nanoscopic reality[J]. Acta Mechanica Sinica,2008,24(2): 111-126.
- [44] Bai Y L, Wang H Y, Xia M F, et al. Trans scale mechanics: looking for the missing links between continuum and micro/ nanoscopic reality [J]. Acta Mechanica Sinica, 2008, 24 (2): 111 – 126.

#### Progress in the Constitutive Models Including Damage of Energetic Materials

#### LI Jun-ling, LU Fang-yun, ZHAO Peng-duo, CHEN Rong

(College of Science, National University of Defense Techonology, Changsha 410073, China)

**Abstract**: The studies and developments in science community of energetic materials with damage mechanics were introduced from two aspects, which are the macro-mechanics phenomenon and the micro-statistic mechanics. The description viewpoints and application ranges of each model were compared and analyzed. It's necessary to upbuild the multi-scale analysis model, and systematically investigate the damage evolution under different loading modes to establish more reasonable constitutive model of energetic materials.

Key words: solid mechanics; energetic materials; constitutive model; continuum damage mechanics; micro-statistics damage mechanics; multi-scale analysis

CLC number: TJ55; O34

**Document code**: A

DOI: 10.3969/j.issn.1006-9941.2010.02.024

# 《绿色・高能・钝感弹药专辑》征稿

随着人们环保意识的增强,"绿色"理念已在全球范围内受到重视,高能、低感及绿色环保成为武器弹 药发展的新趋势。为此,《含能材料》将于2010年第6期(12月)组织出版《绿色·高能·钝感弹药专辑》, 内容涉及新型高能、低感及零(低)污染的新型含能材料的合成、配方、性能测试与表征及相关技术的研究 与应用,绿色弹药的发展、洁净硝化等。

欢迎科研工作者来稿,来稿时请注明《绿色·高能·钝感弹药专辑》。