

文章编号:1006-9941(2024)04-0397-11

浇注PBX替代材料的准静态压缩力学行为及本构模型标定

李思涵¹,王克俭¹,牛余雷²,黄翰哲¹,马梓煜¹

(1.北京化工大学机电工程学院,北京 100029; 2.西安近代化学研究所,陕西 西安 710065)

摘要: 为研究高聚物粘结炸药(PBX)的准静态压缩行为,对两种典型配方(含铝粉与否)的浇注PBX替代材料在不同应变率下进行单轴准静态压缩试验,并对其力学性能进行了对比分析。同时基于朱-王-唐(ZWT)模型提出一种新模型来描述材料的准静态压缩行为,通过遗传算法获取本构模型参数,并使用Fortran语言在Abaqus有限元软件的用户材料子程序(UMAT)接口中进行本构模型的建立。结果表明:浇注PBX替代材料的准静态压缩过程可分为弹性压缩、应力衰减以及失稳破坏3个阶段;准静态压缩力学行为与应变率有明显的相关性,随着应变率的提高,材料的有效压缩应变基本不变,而压缩模量、屈服强度和压缩强度的对数与应变率对数近似呈现出线性关系;铝粉的加入使浇注PBX替代材料压缩模量、屈服强度和压缩强度均有所提升。新构建的本构模型能较好描述浇注PBX替代材料的准静态压缩行为,使用有限元软件对本构模型普适性进行验证,得到仿真计算结果与试验结果间可决系数 R^2 均大于0.98,吻合程度较高。

关键词: 浇注高聚物粘结炸药(PBX)替代材料;准静态压缩;本构模型;UMAT

中图分类号: TJ55

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2023209

0 引言

高聚物粘结炸药(PBX)是以单质炸药为主要成分,辅以各种能改善其加工和使用性能的添加剂,并在一定温度、压力作用下制作而成的一种典型高填充复合材料^[1]。PBX根据其成型工艺主要分为浇注型、压制型和熔铸型3类,其中浇注PBX因尺寸稳定性好、能量密度高、力学性能优异而被广泛应用于常规武器、爆破工程以及航空航天等领域^[2-5]。在实际应用中,浇注PBX会受到不同应变率的载荷作用,在加工、装填以及运输过程中应变率小于 0.1 s^{-1} ^[6]。研究浇注PBX的准静态压缩力学行为对分析其在运输、储存等准静态条件下的安全性以及完整性具有重要意义^[7-8]。

近年来,国内外对浇注PBX类高填充材料在不同应变率下的力学行为已经开展了一些研究。肖有才

等^[9]用糖颗粒和高聚物粘结剂制备了PBX替代材料(PBS)并获得其不同应变率下的力学响应过程,同时利用有限元Abaqus中VUMAT模块编写子程序,模拟了PBS的分离式霍普金森压杆(SHPB)动态压缩实验。Wang等^[10]测试了端羟基聚丁二烯(HTPB)基推进剂在应变率为 $0.4\sim 63\text{ s}^{-1}$ 范围内的单轴压缩力学行为,基于实验结果建立了一种本构模型,描述此范围内HTPB基推进剂的力学响应。Zhang等^[11]采用SHPB实验测试了HTPB基推进剂在应变率 $10^3\sim 10^4\text{ s}^{-1}$ 范围的单轴压缩力学性能,测试结果发现,固体推进剂的最大应力等力学性能参数与应变率显著相关。Xu等^[12]研究了PBX在动态负载条件下的力学响应,并建立了物理模型描述其力学行为。Gordana等^[13]通过对浇注PBX进行准静态拉伸试验,得到其弹性模量、断裂应变等性能参数与温度和其组成成分含量之间的关系。Michel等^[14]在 $-50\sim 60\text{ }^\circ\text{C}$ 温度下对浇注PBX进行了准静态拉伸试验,建立了一种包含5个Maxwell单元的粘弹性模型。Shekhar等^[15]构建了一种本构模型来描述复合固体推进剂在单轴拉伸下的力学行为,将Maxwell模型中的弹簧弹性模量和粘壶粘性系数均转化为与应变率相关的函数,实现对材料率相关性的

收稿日期:2023-09-27;修回日期:2023-11-09

网络出版日期:2024-01-11

作者简介:李思涵(1999-),男,硕士研究生,主要从事高填充复合材料力学行为研究。e-mail:1162743697@qq.com

通信联系人:王克俭(1971-),男,副教授,博士生导师,主要从事塑料加工成型技术研究。e-mail:wangkj@mail.buct.edu.cn

引用本文:李思涵,王克俭,牛余雷,等.浇注PBX替代材料的准静态压缩力学行为及本构模型标定[J].含能材料,2024,32(4):397-407.

LI Si-han, WANG Ke-jian, NIU Yu-lei, et al. Quasi-static Compression Mechanical Behavior and Constitutive Model Calibration of Casting PBX Substitute Materials[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2024, 32(4):397-407.

描述。

如上所述,目前针对浇注PBX类高填充材料的动态力学行为测试多是基于SHPB的动态压缩试验,而其在准静态条件下的力学行为主要通过单轴拉伸试验来研究,对准静态压缩行为的描述较少,而已有研究又发现高能粘结剂和HMX晶体组成的复合PBX在拉伸和压缩载荷下的破坏机制存在差异,两种载荷下的力学性能也不同^[16];同时PBX炸药在贮存、运输过程中因壳体的约束受到外载荷呈现出较多的压缩行为,研究其准静态压缩行为尤为重要。

由于试验条件的限制,且无水硫酸钠的粒径、形貌与炸药组分较为相似^[17],出于安全及准确性考虑,本研究选用现有浇注PBX炸药的粘结剂,用等量无水硫酸钠代替炸药组分获得含铝与不含铝两种典型配方的浇注PBX替代材料,从浇注PBX替代材料在准静态压缩条件下的力学行为出发,分析了应变率、铝粉组分对其影响规律,根据实验数据定量描述了压缩模量、屈服强度和压缩强度对应变率的依赖性。同时,在朱-王-唐(ZWT)本构模型的基础上演变得一种新的模型,经遗传算法拟合得到用于描述准静态条件下浇注PBX替代材料压缩力学行为的最优参数。此外,通过Abaqus有限元软件对浇注PBX替代材料的准静态压缩实验进行仿真模拟,并进行本构模型的普适性验证,为浇注PBX的进一步研究奠定了基础。

1 实验部分

1.1 试剂与仪器

粘结剂,HTPB(IV型),羟值 $0.755\text{ mmol}\cdot\text{g}^{-1}$,数均相对分子质量3000,黎明化工研究院;固化剂,对甲苯二异氰酸酯(TDI),型号100,香港宏兴树脂有限公司;增塑剂,邻苯二甲酸二丁酯(DBP),分析纯,天津化学试剂一厂;铝粉,粒径 $20\ \mu\text{m}$,山东佰伟达新材料有限公司;无水硫酸钠,满足GB/T 6009-2014标准^[18],四川南风化工有限公司。

全自动数字搅拌机,JFT-680,深圳捷飞通科技有限公司;实验室分散机,型号LZGFS-550W,常州乐足机械科技有限公司。聚四氟乙烯模具,自制;真空干燥箱,DZF-6050AB,如益科技有限公司;电子天平,LK322,北京朗科兴业称重设备有限公司;小拉力机,CT3,博勒飞公司。

1.2 试样制备

为研究两种典型配方(含铝粉与否)的力学行为,

了解其在力学性能方面的差异,本研究选定样品1#和2#的配方(质量分数)如表1所示,粘结剂体系的固化参数 $R=1$,质量分数DBP:HTPB=1:1。

表1 浇注PBX替代材料试样的配方组成(质量分数)

Table 1 Formulations of casting PBX substitute material samples (mass fraction)

sample	binder system / %	Al / %	anhydrous sodium sulfate / %
1#	20	0	80
2#	16	20	64

因为圆柱形药柱的长径比对火药的压缩试验结果有非常明显的影响^[19],故本研究按照GJB770B-2005标准^[20]中的415.1选取试件尺寸,试样尺寸要求如表2所示。若原始试样直径为16 mm,则按照表2中样品①进行试样长度的确定;若原始试样直径小于16 mm,则按照②进行试样长度的确定。此外,Iwamoto等^[21]指出,应变率较低时压缩试验件的长径比一般可选为1~2,而高应变率加载时,试验件的长径比可选为0.5~1.0。综上,设置本研究压缩试验药柱的尺寸为 $\Phi 11\text{ mm}\times 11\text{ mm}$ 。

表2 浇注PBX替代材料试样的尺寸^[20]

Table 2 Dimensions of casting PBX substitute material samples^[20]

sample	D / mm		H_0 / mm	
	basic size	limit deviation	basic size	limit deviation
①	16	± 0.1	20	± 0.1
②	D	—	$H_0=D$	± 0.1

Note: D refers to the original sample diameter which is less than 16 mm. H_0 is the height of sample.

按照文献[22]的制备方法,将混合好的药浆浇注入 $\Phi 11\text{ mm}\times 11\text{ mm}$ 的模具中并放入温度设置为 $60\text{ }^\circ\text{C}$ 的真空干燥箱中固化,至固化完全后,脱模并修整药柱表面,得到试样如图1所示。然后进行准静态压缩试验,测试试样的各项力学性能。

1.3 准静态压缩试验

压缩试验在小拉力机上进行,最大压力为250 N;测试探头为 $\Phi 50\text{ mm}$ 的圆柱形探头,以此减小药柱表面平滑度差异对实验结果造成的误差,试验示意图如图2所示。

准静态压缩试验要求压缩时应变率小于 1 s^{-1} 。在小拉力机上设置测试速度分别为 $0.03, 0.3, 3\text{ mm}\cdot\text{s}^{-1}$,经计算得到压缩过程中的应变率分别为 $0.002727,$

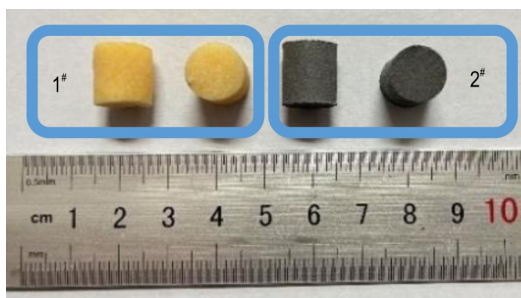


图1 浇注PBX替代材料试样照片

Fig. 1 Photographs of the casting PBX substitute material samples

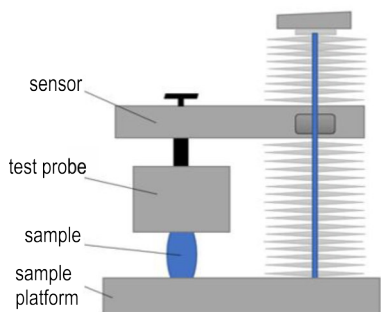


图2 小拉力机进行准静态压缩试验示意图

Fig. 2 Schematic diagram of quasi-static compression test with small tension machine

0.02727, 0.2727 s⁻¹, 触发力为0.05 N, 试验温度为室温, 压缩至仪器量程限度。在每个应变率条件下进行三组试验, 取平均值进行分析。

2 结果与讨论

2.1 药柱压缩前后外观分析

药柱试样经静态压缩试验前后状态如图3所示, 图3a、3b和3c、3d分别为试样1#和2#在不同应变率作用下完全破坏前后的宏观形貌。为方便观察, 使用记号笔对试样1#压缩后表面的裂纹进行颜色加深。从图3b、3d可见, 经准静态压缩后, 试样1#、2#在中部形成以中心启裂为主的“腰鼓”式断裂, 出现多处裂纹。将试样1#、2#从中心高度位置剖开, 剖面如图3e所示。由图3e可发现准静态压缩后, 药柱出现的裂纹停留在试样表面处, 而未蔓延到体心位置。可见, HTPB粘结体系经固化后的弹性与塑性良好, 因此试样经压缩后虽然出现明显裂纹, 但并未出现脱落、破碎的现象。

2.2 单轴准静态压缩结果分析

由于PBX替代材料试样在压缩过程中发生变形较大, 采用真实应力、应变能更精确地反应其性能。压缩过

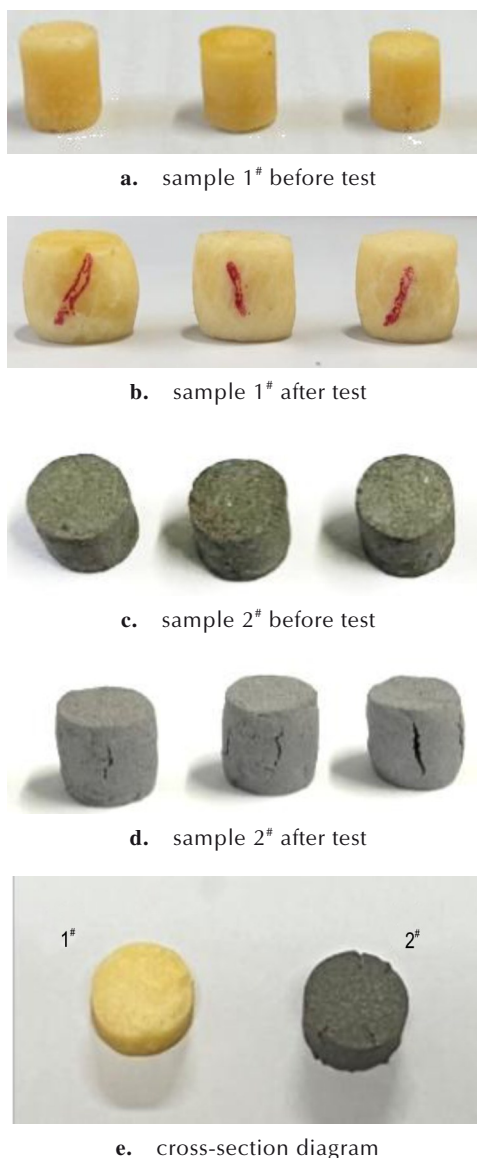


图3 试样1#、2#准静态压缩前后图像

Fig. 3 Images of samples 1# and 2# before and after quasi-static compression

程中真实应力 σ_{true} 和应变 ϵ_{true} 的计算如公式(1)^[23]所示。

$$\begin{cases} \epsilon_{true} = -\ln(1 - \epsilon_{eng}) \\ \sigma_{true} = \sigma_{eng}(1 - \epsilon_{eng}) \end{cases} \quad (1)$$

式中, ϵ_{eng} 为工程应变; σ_{eng} 为工程应力, MPa。

根据试验结果得到不同应变率条件下试样的压缩应力-应变曲线, 经式(1)计算转化为真实应力-应变曲线如图4所示。从图4可看出, 当应变小于0.05时, 曲线存在一个非线性区域, 此区域内PBX替代材料试样的应力变化相对较小; 当应变大于0.05时, 应力明显增大。这可能是试验过程中无法完全保证试样上下两个端面平行所导致的, 当测试探头作用于试样时, 开始

只有上端面的一部分与之接触,产生一个很小的力,随后才作用于整个上端面,产生出一个较大的力。

从图4还可看出,不同应变率作用下两种PBX替代材料试样的应力-应变曲线均有相似的规律,即压缩过程中应力增加速率呈现出快-慢-快的变化规律,直至失效破裂仍然表现出应力增大的趋势。对比图4a、4b可知PBX替代材料试样达到相同应力状态时,试样2#的应变远小于试样1#,这表明试样2#中铝粉提升了PBX替代材料试样的强度。此外,试样1#和2#在同一应变状态下的压缩应力随应变率的增大而增大,说明PBX替代材料试样具有明显的率相关性。

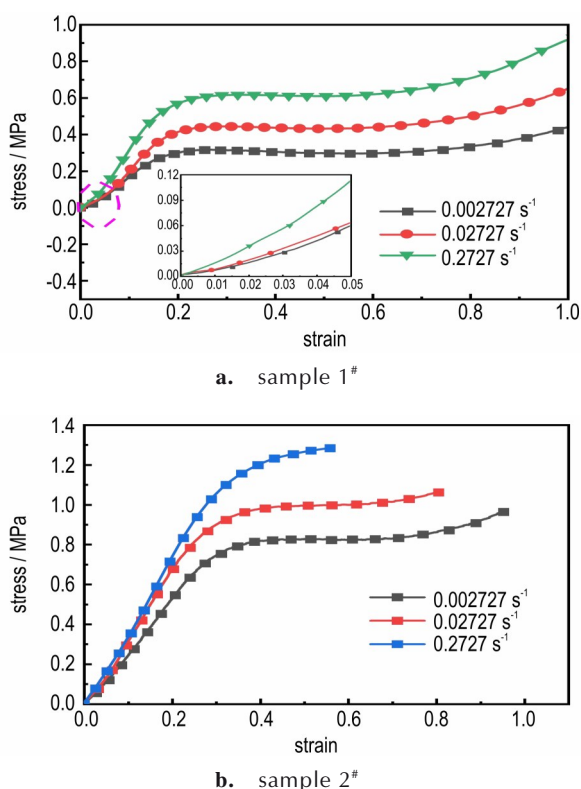


图4 不同应变率下试样1#、2#真实应力-应变曲线
Fig.4 Real stress-strain curves of samples 1# and 2# at different strain rates

为深入分析浇注PBX替代材料试样在不同应变率下的力学行为,且由于试样1#能全面反应出各应变率下PBX替代材料试样准静态压缩过程的各个阶段,因此选取试样1#对其压缩应力-应变曲线及变形过程进行研究,如图5所示。定义图5中B为脱湿点(屈服点),C点对应的应力和应变分别为压缩强度和有效压缩应变, E_c 为压缩模量。由图5可以看出,通过转折点B和C可将试样1#的压缩真实应力-应变曲线划分为3个阶段:(1)阶段I为弹性压缩阶段,随着应力的不

断增大,曲线近似为线性关系,这是因为粘结剂的弹性变形作用,使得试样1#在该阶段的形变以弹性形变为主,同时内部发生可恢复的弹性损伤,这一阶段主要是试样1#内部微裂纹逐渐聚集的过程;(2)阶段II是应力衰减阶段,到达B点后,此时试样1#已经产生宏观裂纹并且不断扩展,使基体的承载能力降低,应力随应变增加而发生一定程度的减小;(3)阶段III是变形失稳直至破坏阶段,到达C点后,试样1#出现贯穿上下表面的明显裂纹,应力随应变的增加而增大,这是由于随着形变量的继续增加,基体失去承载能力,载荷施加于固体颗粒上,且准静态压缩条件下加载速率慢,颗粒具有延展性,能承受一定的载荷而发生变形,这种延展性对材料宏观力学特性有强化作用,表现为应力随应变的增加而增大。

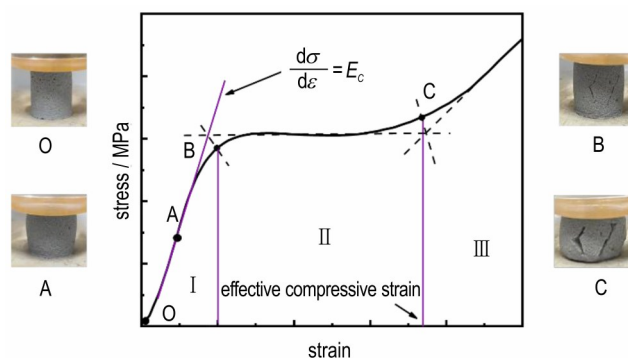


图5 试样1#压缩应力-应变曲线及变形过程
Fig.5 Compressive stress-strain curve and deformation process of samples 1#

表3为不同应变率下试样1#、2#的压缩模量、屈服强度、压缩强度和有效压缩应变。由表3可以看出,试样1#、2#的有效压缩应变基本不随应变率的增大而变化,这可能是因为PBX替代材料试样在压缩状态下其内部裂纹扩展速度快,在应变达到一定程度时,裂纹已经扩展完全,试样发生失效。此外,根据表3还可以发现,试样1#、2#的压缩模量、屈服强度和压缩强度随应变率的增加而增加,表现出明显的率相关性。对比试样1#、2#的各压缩行为参数值,可发现同一应变率下铝粉的加入使PBX替代材料试样的压缩模量、屈服强度和压缩强度均有所提升,其中屈服强度和压缩强度提升较大,可达100%以上,压缩模量最高可提升29.81%,但对试样的有效压缩应变影响不大。此外,随着应变率增大,铝粉的加入对试样1#、2#压缩模量、屈服强度和压缩强度的提升幅度减弱,压缩模量提升幅度由29.81%减少至1.06%,屈服强度提升幅度由160.00%减少至107.02%。分析认为这是由于铝粉

表 3 不同应变率下浇注 PBX 替代材料试样的压缩行为参数

Table 3 Compression behavior parameters of casting PBX substitute material samples at different strain rates

sample	strain rate / s ⁻¹	compression modulus / MPa	yield strength / MPa	compressive strength / MPa	effective compressive strain
1 [#]	0.002727	2.08	0.30	0.32	0.72
	0.02727	2.82	0.42	0.46	0.71
	0.2727	3.76	0.57	0.65	0.71
2 [#]	0.002727	2.70	0.78	0.85	0.76
	0.02727	3.32	0.91	1.03	0.75
	0.2727	3.80	1.18	—	—

的粒径相对于无水硫酸钠来说较小,可以填充在无水硫酸钠颗粒堆积的空隙中,减少了颗粒间的粘结剂含量,从而增强了 PBX 替代材料试样的模量及强度,减弱了其率相关性。

2.3 压缩行为参数与应变率的关系

为更好地研究 PBX 替代材料试样在不同压缩条件下的行为特征,预测其在不同应变率下的压缩行为参数,取试样 1[#]、2[#]各压缩行为参数的对数值随应变率对数值的变化曲线,如图 6 所示,发现在低应变率状态下,其参数的对数值与应变率对数值呈现出明显的线

性关系,因此采用线性函数对其进行拟合,拟合结果如表 4 所示。

为验证表 4 所得关系式的准确性,对试样 1[#]、2[#]进行了应变率为 0.1 s⁻¹ 条件下的压缩试验,得到其压缩行为参数值,计算各参数实验值和公式预测值之间的误差并记录在表 5。由表 5 可知误差值最大为 6.78%,这验证了表 4 中公式的可靠性,使用表 4 的关系式可预测不同低应变率下 PBX 替代材料试样的压缩模量、屈服强度和压缩强度。

表 4 试样 1[#]、2[#]压缩行为参数的对数与应变率对数的拟合关系

Table 4 Fitting relationship between the logarithms of compressive behavior parameters and the logarithm of strain rate for samples 1[#] and 2[#]

sample	parameter	fitting function	coefficient of determination
1 [#]	compression modulus	$\lg E = 0.13 \times \lg \dot{\epsilon} + 0.64$	0.995
	yield strength	$\lg E = 0.14 \times \lg \dot{\epsilon} - 0.17$	0.998
	compressive strength	$\lg E = 0.16 \times \lg \dot{\epsilon} - 0.10$	0.997
2 [#]	compression modulus	$\lg E = 0.074 \times \lg \dot{\epsilon} + 0.63$	0.986
	yield strength	$\lg E = 0.090 \times \lg \dot{\epsilon} + 0.11$	0.979

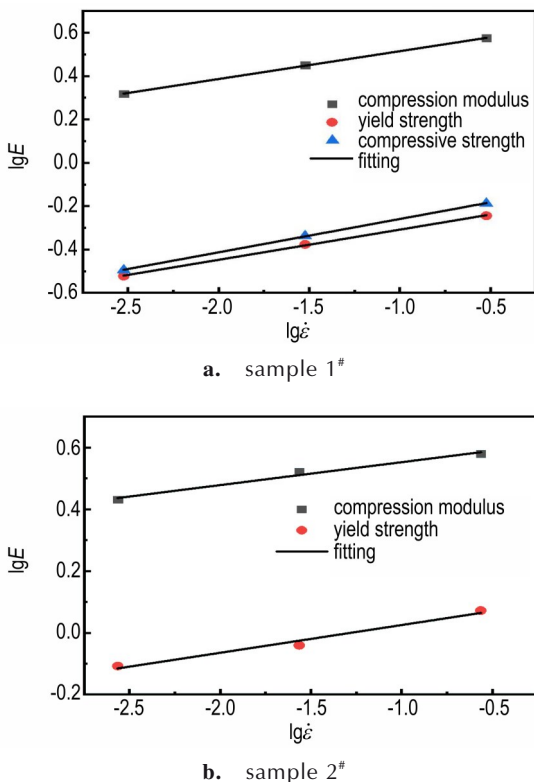


图 6 试样 1[#]、2[#]压缩行为参数的对数随应变率对数的变化曲线

Fig.6 Changing curves of the logarithms of compression behavior parameters with the logarithm of strain rates for samples 1[#] and 2[#]

3 本构模型

3.1 本构模型建立

通过上述试验可知, PBX 替代材料试样的力学状态受到应变以及应变率的影响。目前大多数本构关系都是通过试验数据拟合的经验本构,且有一定的适用范围,如朱-王-唐(ZWT)非线性粘弹性本构方程,它可以描述如热塑性塑料、有机玻璃、混凝土等材料^[24-26]在粘弹性变形范围内的力学性能。它由一个非线性弹性体和两个 Maxwell 体并联而成,如图 7 所示。第一个 Maxwell 体描述准静态、低应变率的粘弹性响应,第二个 Maxwell 体描述动态、高应变率的粘弹性响应,其

表5 0.1 s⁻¹应变率下试样1[#]、2[#]压缩行为参数实验值与预测值及误差Table 5 Experimental, predicted values and their errors of compression behavior parameters for samples 1[#] and 2[#] at 0.1 s⁻¹

sample	compression modulus			yield strength			compressive strength		
	experimental value / MPa	predicted value / MPa	error	experimental value / MPa	predicted value / MPa	error	experimental value / MPa	predicted value / MPa	error
1 [#]	3.16	3.24	2.53%	0.48	0.49	2.08%	0.59	0.55	6.78%
2 [#]	3.72	3.60	3.22%	1.10	1.05	4.55%	—	—	—

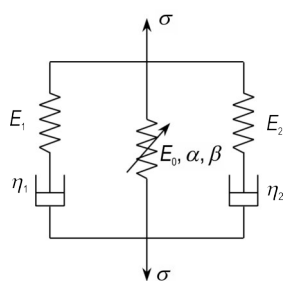


图7 ZWT本构模型

Fig.7 ZWT constitutive model

本构方程如公式(2):

$$\sigma(t) = E_0 \varepsilon(t) + \alpha \varepsilon(t)^2 + \beta \varepsilon(t)^3 + E_1 \int_0^t \dot{\varepsilon}(\tau) e^{-\frac{t-\tau}{\theta_1}} d\tau + E_2 \int_0^t \dot{\varepsilon}(\tau) e^{-\frac{t-\tau}{\theta_2}} d\tau \quad (2)$$

式中, σ 为应力, MPa; ε 为应变, 无量纲; E_0 、 α 、 β 为非线性弹性常数, MPa; E_1 、 E_2 为低应变率、高应变率线性弹性模量, MPa; θ_1 、 θ_2 为低应变率、高应变率松弛时间, s; $\dot{\varepsilon}$ 为应变率, s⁻¹; t 为时间, s。

ZWT本构模型系数需要通过准静态实验和动态实验拟合得到, 而本研究针对的是浇注PBX替代材料试样准静态压缩条件下力学行为的描述, 故选择忽略其中一个Maxwell体, 可得到本构方程如公式(3):

$$\sigma = E_0 \varepsilon + \alpha \varepsilon^2 + \beta \varepsilon^3 + E_1 \theta_1 \dot{\varepsilon} \left[1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\dot{\varepsilon} \theta_1}\right) \right] \quad (3)$$

3.2 参数拟合

在对参数拟合时, 目前大多选用作差法^[27]来进行, 即首先选取两条不同应变率的准静态应力-应变曲线

线并相减, 得到只含有 E_1 和 θ_1 的应力-应变曲线, 并通过最小二乘法拟合出 E_1 和 θ_1 ; 然后, 把 E_1 和 θ_1 带入公式(3), 通过选取准静态下的一条应力-应变曲线拟合出 E_0 、 α 、 β , 得到低应变率下本构模型的表达式。但使用此种方法确定本构模型未知参数时, 理论上只需要两条曲线即可, 这就增强了各个参数之间的独立性, 使以此种方法获得的本构模型难以对其它应变率下的压缩曲线进行预测。此外, 在对参数拟合时, 由于本构模型含有5个参数, 一般拟合方法容易出现拟合不收敛或局部最优解的情况, 而遗传算法作为一种全局随机优化算法, 能够快速可靠地求解此类难题, 具有固有的并行性和并行计算的能力^[28], 因此本研究中采用遗传算法对本构模型进行编程拟合, 得到 E_1 、 θ_1 、 E_0 、 α 、 β 值。由于本构模型中并未包含用于描述材料损伤行为的项, 所以此本构模型只能用于描述材料屈服前的压缩行为, 不能描述实验中PBX替代材料试样鼓形变形和出现裂纹的现象。

对于本次试验结果, 在试样1[#]、2[#]应变分别为15%、28%范围内(材料未发生损伤), 首先选取准静态应变率为0.002727 s⁻¹的应力-应变曲线, 使用Origin软件对其进行多次三次项拟合, 确定各参数取值范围, 随后通过Matlab软件使用遗传算法对本构方程进行拟合, 得到最优参数值记录在表6, 并作图4中实验值和拟合值的对比图(如图8所示)。由图8可以看出试样1[#]、2[#]在不同准静态应变率作用下本构模型的拟合情况, 结合表6中拟合参数的可决系数 R^2 可见建立

表6 ZWT模型最优拟合参数

Table 6 Optimal fitting parameters of ZWT model

sample	strain rate / s ⁻¹	E_0 / MPa	α / MPa	β / MPa	E_1 / MPa	θ_1 / MPa	R^2
1 [#]	0.002727						0.9967
	0.02727	1.7035	6.0469	-49.2531	1.8000	2.5993	0.9871
	0.2727						0.9873
2 [#]	0.002727						0.9998
	0.02727	1.0367	13.1242	-28.9888	1.1343	9.1263	0.9992
	0.2727						0.9974

Note: E_0 、 α 、 β are non-linear elastic constants. E_1 is the elastic moduli for low strain rate. θ_1 is the relaxation times for low strain rate. R^2 is coefficient of determination.

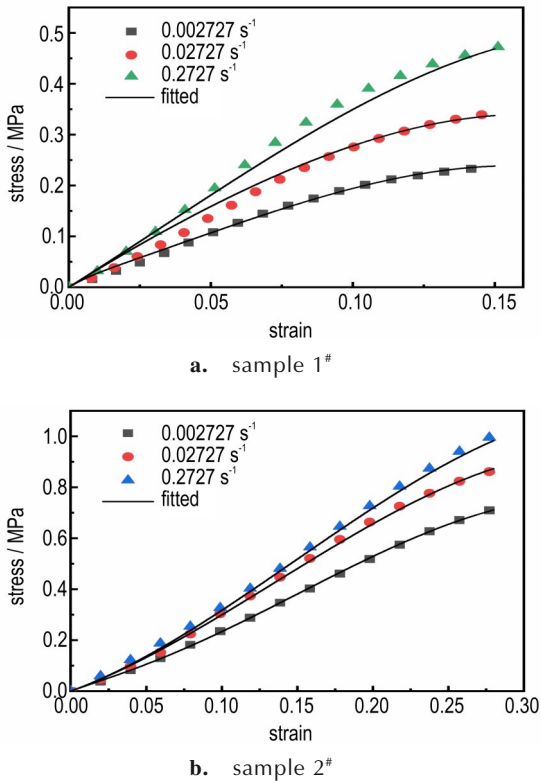


图 8 试样 1#、2# 实验与拟合应力-应变数据的比较
 Fig.8 Comparison of experimental and fitted stress-strain data for samples 1# and 2#

$$[A] = \frac{1}{(1 + \mu)(1 - 2\mu)} \begin{bmatrix} 1 - \mu & \mu & \mu & 0 & 0 & 0 \\ \mu & 1 - \mu & \mu & 0 & 0 & 0 \\ \mu & \mu & 1 - \mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1 - 2\mu}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1 - 2\mu}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1 - 2\mu}{2} \end{bmatrix} \quad (5)$$

式中, μ 为泊松比, 取值为 0.32。

将代表非线性弹性的元件进行差分, 得到其在时间增量的增量 ΔK_{ij}^t 如公式(6):

$$\Delta K_{ij}^t = (E_0 + 2\alpha \epsilon_{ij} + 3\beta \epsilon_{ij}^2) [A] \Delta \epsilon_{kl} \quad (6)$$

把低应变率粘壶项应力张量记为 P_{ij} , 可得到其在时间增量的增量 ΔP_{ij}^t 如公式(7):

$$\begin{aligned} \Delta P_{ij}^t &= P_{ij}^{t+\Delta t} - P_{ij}^t \\ &= E_1 \theta_1 \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\theta_1}} \right) [A] \frac{\Delta \epsilon_{kl}}{\Delta t} - \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\theta_1}} \right) P_{ij}^t \end{aligned} \quad (7)$$

式中, $P_{ij}^{t+\Delta t}$ 为粘壶项在 $t+\Delta t$ 时刻的应力张量, P_{ij}^t 为粘壶项在 t 时刻的应力张量, Δt 为时间增量。

的本构模型能较为准确地描述出 PBX 替代材料试样的压缩行为。

3.3 本构模型验证

研究采用 Abaqus 软件对浇注 PBX 替代材料的准静态压缩试验进行仿真验证。由于 Abaqus 仿真软件的材料库中没有适用于模拟 PBX 替代材料的非线性粘弹性力学行为模型, 因此, 使用 Abaqus 提供的用户材料子程序 (UMAT) 接口进行二次开发, 将新本构模型添加到 Abaqus 中, 并根据试验要求进行浇注 PBX 替代材料准静态压缩行为的模拟。

3.3.1 本构方程子程序

由于一维形式的本构模型不能满足三维结构的有限元计算, 所以在编写 UMAT 程序前, 需要将本构模型从一维形式转变为三维增量形式。根据弹塑性力学理论, 运用第二类 Piola-Kirchhoff 应力张量和 Green-Lagrange 应变张量将公式(3)拓展为三维状态^[29], 如公式(4):

$$S_{ij} = E_0 [A] \epsilon_{kl} + \alpha \epsilon_{ij}^2 + \beta \epsilon_{ij}^3 + E_1 \int_0^t [A] \frac{\partial \epsilon_{kl}}{\partial \tau} e^{-\frac{t-\tau}{\theta_1}} d\tau \quad (4)$$

式中, S_{ij} 和 ϵ_{ij} 分别为第二类 Piola-Kirchhoff 应力张量和 Green-Lagrange 应变张量的分量, 转换矩阵 $[A]$ 如公式(5):

综上, 可得到本构模型的三维增量形式如公式(8):

$$\begin{aligned} \Delta S_{ij}^t &= (E_0 + 2\alpha \epsilon_{ij} + 3\beta \epsilon_{ij}^2) [A] \Delta \epsilon_{kl} + \\ &E_1 \theta_1 \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\theta_1}} \right) [A] \frac{\Delta \epsilon_{kl}}{\Delta t} - \left(1 - e^{-\frac{\Delta t}{\theta_1}} \right) P_{ij}^t \end{aligned} \quad (8)$$

式中, ΔS_{ij}^t 为本构模型应力张量在时间增量的增量。

与拉伸不同, 由于 Abaqus 在压缩时试样应变值为负值, 所以在进行子程序编写时需将 α 前符号变为负, 根据公式(8)所述的本构模型三维增量形式, 对用户自定义材料子程序进行编写计算, 流程如下图 9 所示。

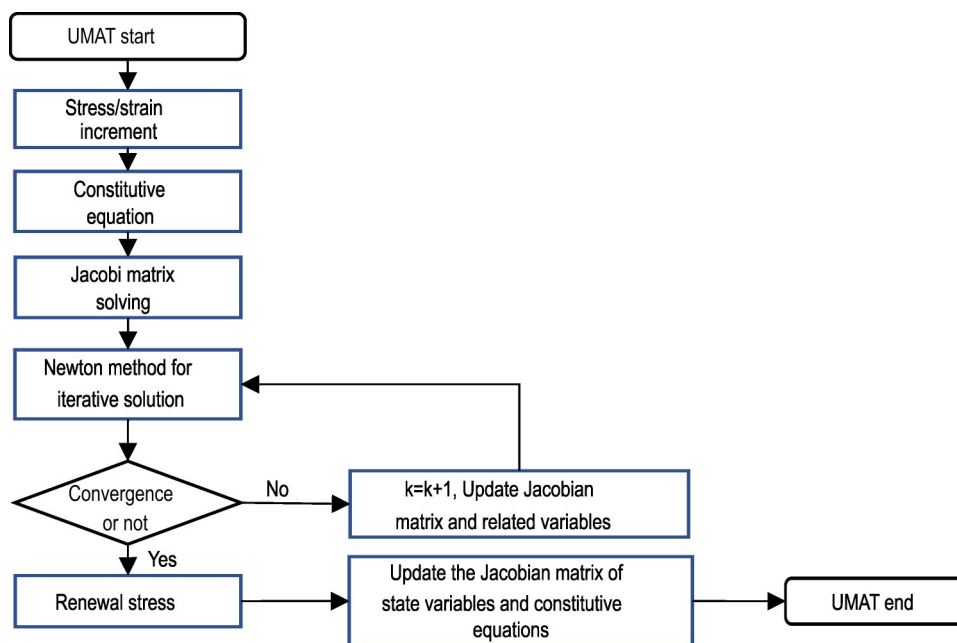


图9 UMAT子程序实现流程

Fig.9 UMAT subroutine implementation flow

UMAT开始被调用时,主程序将当前积分点的应力张量、应变张量和应变增量传递至子程序中,子程序使用主程序传递的变量求解雅可比矩阵,并利用Newton法进行迭代求解直至达到收敛条件,之后更新应力张量、状态变量和雅可比矩阵,在子程序运行结束时传递至主程序中。

3.3.2 子程序验证

在Abaqus中建立如图10所示模型,模型为和试验相同尺寸($\Phi 11\text{ mm} \times 11\text{ mm}$)的圆柱体试样,并划分网格,网格类型为八节点六面体单元。边界条件为一端固定,另一端施加z轴正方向的固定位移载荷,对此模型进行压缩受力仿真。

在软件界面中输入表6拟合所得到的本构参数,

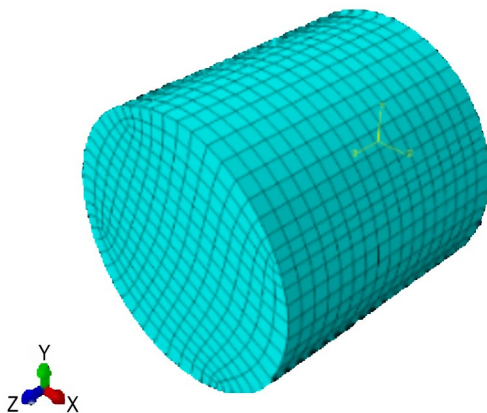


图10 试样的有限元模型图

Fig.10 Finite element model diagram of the sample

以获得应力-应变曲线,并与实验结果进行对比(如图11)。计算可决系数 R^2 ,并将其记录在表7中。图11表明,有限元仿真结果与实验结果具有良好的一致性,

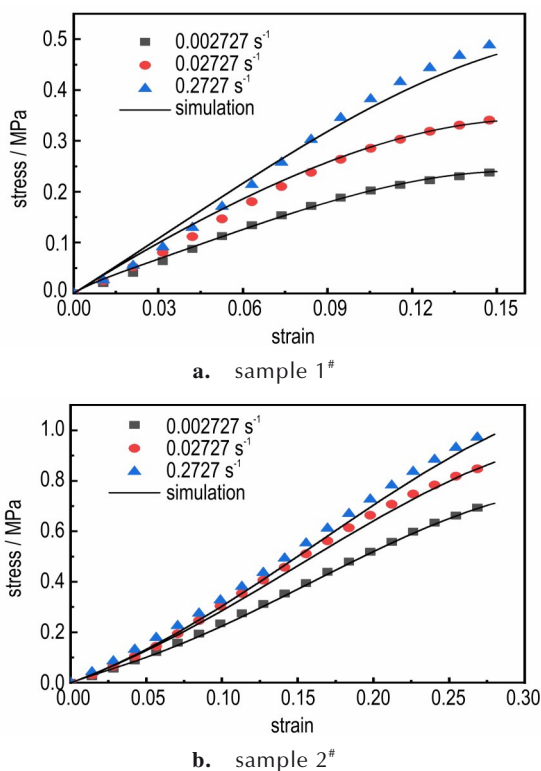


图11 试样1#、2#在不同应变率下应力-应变实验值与仿真值比较

Fig.11 Comparison of experimental and simulated stress-strain values at different strain rates for samples 1# and 2#

表 7 试样 1[#]、2[#]在不同应变率下应力-应变实验值与仿真值的可决系数

Table 7 Coefficients of determination between experimental and simulated stress-strain values at different strain rates for samples 1[#] and 2[#]

strain rate / s ⁻¹	R ²	
	sample 1 [#]	sample 2 [#]
0.002727	0.9964	0.9988
0.02727	0.9868	0.9953
0.2727	0.9876	0.9928

通过计算得到的可决系数 R² 大于 0.98 也证明了这一点。这一结果验证了所编制的 UMAT 程序的正确性。

3.3.3 本构模型普适性验证

为验证本构模型的普适性,将 2.3 节得到的试样 1[#]、2[#]在 0.1 s⁻¹ 应变率作用下的压缩实验数据与所构建有限元模型仿真模拟的数据进行比较,如图 12 所示。经计算可得,可决系数 R² 均大于 0.98,结合图 12,说明了本研究构建的本构模型可以预测应变率 0.1 s⁻¹ 下 PBX 替代材料试样的应力应变行为,一定程度上验证了本构模型的普适性。

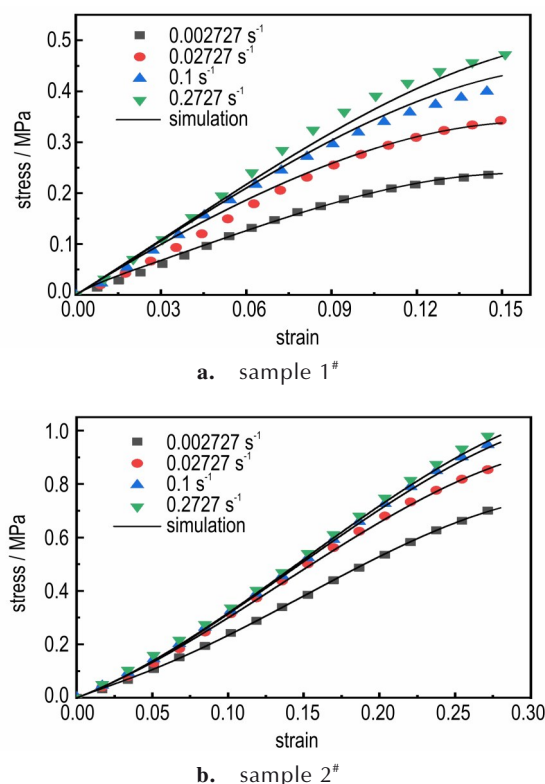


图 12 试样 1[#]、2[#]在 0.1 s⁻¹ 应变率下应力-应变实验值与仿真值比较

Fig. 12 Comparison of experimental and simulated stress-strain values for samples 1[#] and 2[#] at 0.1 s⁻¹

4 结论

针对浇注 PBX 替代材料的准静态压缩力学行为,本研究开展了不同应变率下的压缩试验及本构模型的标定与开发研究,得到结论如下:

(1)不同应变率作用下 PBX 替代材料试样的压缩过程可分为弹性压缩、应力衰减和失稳破坏 3 个阶段。应变率的增加和铝粉的加入使 PBX 替代材料试样的压缩模量、屈服强度和压缩强度均有所增加,且铝粉的加入减弱了 PBX 替代材料试样的率相关性。

(2)通过对 PBX 替代材料试样压缩行为参数的进一步研究,发现其压缩模量、屈服强度和压缩强度的对数与应变率对数近似呈线性关系,并得到了能预测不同低应变率下 PBX 替代材料试样压缩行为参数的关系式。

(3)基于 ZWT 模型建立了描述 PBX 替代材料试样准静态压缩行为的本构方程,较好地表征了 PBX 替代材料试样在不同应变率下未发生损伤时的力学行为;并基于此开发了 UMAT 子程序,依靠 UMAT 子程序对材料压缩过程中的应力-应变关系进行有限元仿真,将有限元仿真结果与试验结果进行对比,发现其准确程度较高,并验证了本构方程的普适性,为浇注 PBX 的进一步研究奠定了基础。

5 参考文献:

- [1] WANG X J, WU Y Q, HUANG F L, et al. Mesoscale thermal-mechanical analysis of impacted granular and polymer-bonded explosives [J]. *Mechanics of Materials*, 2016, 99: 68-78.
- [2] CHEN P, YUAN B H, CHEN R, et al. Compression and shear experimental study of PBX explosive [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2018, 43(12): 1245-1250.
- [3] XIAO Y C, SUN Y, ZHEN Y B, et al. Characterization, modeling and simulation of the impact damage for polymer bonded explosives [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2017, 103: 149-158.
- [4] HE Z H, HUANG Y Y, JI G F, et al. Electron properties and thermal decomposition behaviors for HMX/HTPB plastic-bonded explosives [J]. *Journal of Physical Chemistry C*, 2019, 123(39): 23791-23799.
- [5] 李尚昆, 黄西成, 王鹏飞. 高聚物黏结炸药的力学性能研究进展 [J]. *火炸药学报*, 2016, 39(4): 1-11.
LI Shang-kun, HUANG Xi-cheng, WANG Peng-fei. Recent advances in the investigation on mechanical properties of PBX [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2016, 39(4): 1-11.
- [6] 胡雪垚, 聂贻韬, 沈飞, 等. 考虑应变率及密度影响的含铝 PBX 炸药本构模型 [J]. *火炸药学报*, 2021, 44(5): 631-636.
HU Xue-yao, NIE Yi-tao, SHEN Fei, et al. A constitutive mod-

- el of aluminized PBX explosive considering the effects of strain rate and density [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2021, 44(5): 631-636.
- [7] CHATTI M, GRATTON M, CALIEZ M, et al. Experimental investigation of the behavior of a simulat material for plastic-bonded explosives and modelling of the effectivity and damage induced anisotropy [J]. *Mechanics of Materials*, 2022, 172: 104388.
- [8] LIU J H, YANG Z J, LIU S J, et al. Effects of fluoropolymer binders on the mechanical properties of TATB-based PBX [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2018, 43 (7) : 664-670.
- [9] 肖有才, 洪志雄, 蒋海燕, 等. PBX模拟炸药的动态力学行为及损伤本构研究[J]. *火炸药学报*, 2022, 45(3): 339-347.
XIAO You-cai, HONG Zhi-xiong, JIANG Hai-yan, et al. Research on dynamic mechanical behavior and damage constitutive model of PBX substitute material [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2022, 45(3): 339-347.
- [10] WANG Z J, QIANG H F, WANG T J, et al. A thermovisco-hyperelastic constitutive model of HTPB propellant with damage at intermediate strain rates [J]. *Mech Time-Dependent Mater*, 2018, 22: 291-314.
- [11] ZHANG H N, LIU M, MIAO Y G, et al. Dynamic mechanical response and damage mechanism of HTPB propellant under impact loading [J]. *Materials*, 2020, 13(13): 3031.
- [12] Xu W Z, Guo F W, LIANG X, et al. Dynamic response properties of polymer bonded explosives under different excitation by deceleration [J]. *Materials & Design*, 2021, 206: 109810.
- [13] ANTIC G, RODIC V, BORKOVIC Z. Influence of content and dispersion of octogene and oxidizer on the mechanical properties of cast aluminized PBX [J]. *Scientific Technical Review*, 2008, 58(2): 51-59.
- [14] QUIDOT M, RACIMOR P, CHABIN P. Constitutive models for PBX at high strain rate [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2000, 505(1): 687.
- [15] SHEKHAR H, KANKANE D K. Viscoelastic characterization of different solid rocket propellants using the Maxwell spring-dashpot model [J]. *Central European Journal of Energetic Materials*, 2012, 9(3): 189-199.
- [16] ELLIS K, LEPPARD C, RADESK H. Mechanical properties and damage evaluation of a UK PBX [J]. *Journal of Materials Science*, 2006, 40(23): 6241-6248.
- [17] 马慧, 刘玉存, 柴涛, 等. 固化温度及固化剂种类对模拟PBX浇注炸药力学性能的影响 [J]. *爆破器材*, 2021, 50(2): 18-23.
MA Hui, LIU Yu-cun, CAI Tao, et al. Effect of curing temperature and curing agent on mechanical properties of simulated PBX pouring explosive [J]. *Explosive Materials*, 2021, 50(2): 18-23.
- [18] 中国石油和化学工业联合会. GB/T 6009-2014: 工业无水硫酸钠[S]. 北京: 中国标准出版社, 2014.
China Petroleum and Chemical Industry Federatio. GB/T 6009-2014: Anhydrous sodium sulfate for industrial use [S]. Beijing: China Standard Press, 1996.
- [19] Williamson D, Palmer S, Grantham S, et al. Mechanical properties of PBS9501 [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2004. 706(1): 816-822.
- [20] 国防科学技术工业委员会. GJB770B-2005: 火药试验方法[S]. 北京: 国防科工委军标出版发行部, 2005.
Commission of Science, Technology and Industry for National Defense of People's Republic of China. GJB770B-2005: Test method of propellant [S]. Beijing: Department of Military Standards Publishing and Distribution, Science and Technology Committee of National Defense, 2005.
- [21] IWAMOTO T, YOKOYAMA T. Effects of radial inertia and end friction in specimen geometry in split Hopkinson pressure bar tests: a computational study [J]. *Mechanics of Materials*, 2012, 51: 97-109.
- [22] 陈春燕, 南海, 李昆, 等. 动态加载下不同特性浇注聚合物粘结炸药的力学响应研究 [J]. *化工新型材料*, 2021, 49(7): 162-166.
CHEN Chun-yan, NAN Hai, LI Kun, et al. Study on mechanical response of poured polymer bonded explosive with different properties under dynamic loading [J]. *New Chemical Materials*, 2021, 49(7): 162-166.
- [23] 王博伦, 王韬, 相宁, 等. 聚碳酸酯中应变率压缩力学特性研究 [J]. *材料工程*, 2021, 49(12): 147-155.
WANG Bo-lun, WANG Tao, XIANG Ning, et al. Mechanical properties of polycarbonate under intermediate strain rates compression [J]. *Journal of Materials Engineering*, 2021, 49(12): 147-155.
- [24] 李为民, 许金余. 玄武岩纤维混凝土的冲击力学行为及本构模型 [J]. *工程力学*, 2009, 26(1): 86-91.
LI Wei-min, XU Jin-yu. Dynamic behavior and constitutive model of basalt fiber reinforced concrete under impact loading [J]. *Engineering Mechanics*, 2009, 26(1): 86-91.
- [25] 雷经发, 沈强, 刘涛, 等. 熔融沉积工艺参数对热塑性聚氨酯弹性体静态力学性能的影响 [J]. *中国塑料*, 2022, 36(5): 29-35.
LEI Jing-fa, SHEN Qiang, LIU Tao, et al. Influence of fused deposition process parameters on static and dynamic mechanical properties of thermoplastic polyurethane elastomer [J]. *China Plastics*, 2022, 36(5): 29-35.
- [26] 王综轶, 王元清, 杜新喜, 等. 不同温度下有机玻璃厚板的准静态拉伸试验研究 [J]. *东南大学学报(自然科学版)*, 2018, 48(1): 132-137.
WANG Zong-yi, WANG Yuan-qing, DU Xin-xi, et al. Quasi-static tensile test of thick acrylic sheets at different temperatures [J]. *Journal of Southeast University(Natural Science Edition)*, 2018, 48(1): 132-147.
- [27] 陈雄, 许进升, 郑健. 固体推进剂黏弹性力学 [M]. 北京: 北京理工大学出版社, 2016: 154-157.
CHEN Xiong, XU Jin-sheng, ZHENG Jian. Viscoelastic mechanics of solid propellants [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 2016: 154-157.
- [28] 程军飞, 陈兴, 邓益民, 等. 遗传算法在动态黏弹性模型参数拟合中的应用研究 [J]. *中国塑料*, 2018, 32(8): 96-104.
CHENG Jun-fei, CHEN Xing, DENG Yi-min, et al. Study on application of genetic algorithm in parameters fitting of dynamic viscoelastic model [J]. *China Plastics*, 2018, 32(8): 96-104.
- [29] WANG J, XU Y J, ZHANG W D. Finite element simulation of PMMA aircraft windshield against bird strike by using a rate and temperature dependent nonlinear viscoelastic constitutive model [J]. *Composite Structures*, 2014, 108: 21-30.

Quasi-static Compression Mechanical Behavior and Constitutive Model Calibration of Casting PBX Substitute Materials

LI Si-han¹, WANG Ke-jian¹, NIU Yu-lei², HUANG Han-zhe¹, MA Zi-yu¹

(1. College of Mechanical and Electrical Engineering, Beijing University of Chemical Technology, Beijing 100029, China; 2. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: In order to study the quasi-static compression behavior of polymer bonded explosive (PBX), the uniaxial quasi-static compression tests were carried out on two typical PBX substitute materials (with and without aluminum powder) at different strain rates, and their mechanical properties were compared and analyzed. Based on the Zu-Wang-Tang (ZWT) model, a new model was proposed to describe the quasi-static compression behavior of materials. The constitutive model parameters were obtained by genetic algorithm, and the model was developed by using Fortran language in the User Material (UMAT) subroutine interface of Abaqus finite element analysis software. Results show that the quasi-static compression process of casting PBX substitute materials can be divided into three stages: elastic compression, stress decay and instability failure. The mechanical behavior of quasi-static compression is obviously correlated with the strain rate. With the increase of the strain rate, the effective compressive strain of the material is basically unchanged, while the logarithms of compression modulus, yield strength and compressive strength are linearly related to the logarithm of strain rate. The addition of aluminum powder can improve the compression modulus, yield strength and compression strength of casting PBX substitute materials. The newly constructed constitutive model can better describe the quasi-static compression behavior of casted PBX substitute materials, and its universality is validated by the finite element analysis software. The coefficients of determination (R^2) between the simulated and experimental results are higher than 0.98, indicating a high level of consistency.

Key words: casting polymer bonded explosive (PBX) substitute materials; quasi-static compression; constitutive model; UMAT

CLC number: TJ55

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2023209

(责编: 卢学敏)