

基于多孔粘弹性有限元本构模型的 ABAQUS 用户子程序开发

张 亚

第二炮兵工程学院 201 室，西安，洪庆，710025

摘 要：依据粘弹性力学理论和美国 Illinois 大学的 F.Xu 和 Sofronis 的研究成果，从线性粘弹性微分本构模型和虚应力原理出发，推导出了含空穴缺陷的线粘弹性材料本构的传统积分表达式。至于其积分式中的 prony 级数，则在里面考虑了空穴率及其增长的影响。根据测定的推进剂剪切松弛模量校正了复合固体推进剂在该多孔线粘弹性本构模型中的材料输入参数。基于此模型编制相应的 ABAQUS 用户子程序 (UMAT)，将计算结果与单轴加载实验进行了比较，

关键词：粘弹性，多孔材料，用户自程序，固体推进剂

1 引言

大型有限元分析软件 ABAQUS 具有强大的非线性求解能力和便捷的子程序接口及相应的二次开发功能，并被广泛地应用于工程科学计算与分析中。在国外，ABAQUS 在推进剂材料本构分析中应用研究非常普遍，并且近年来在国内也开始得到关注与重视。ABAQUS 中的用户材料子程序为用户提供了自定义材料本构模型的程序接口，用户可通过 Fortran 或者 VC 编程来实现所要解决的工程科学问题中所需要的特定材料模型。在推进剂材料领域中遇到了大量的材料非线性、几何非线性以及接触非线性等复杂问题。ABAQUS 中现有材料库中对推进剂材料的分析往往采取粘弹性分析和超弹性分析。推进剂制造、老化或长期贮存发生缓慢化学反应等过程中，在推进剂中的颗粒周围都有可能会出现微观的空穴，此过程的演化将会造成颗粒和粘合剂的脱粘、推进剂的脱湿等，并且在外载荷的作用下，此过程有加剧的趋势。因此，研究含空穴缺陷的线粘弹性本构方程十分必要。为此，本文利用用户材料子程序(UMAT)接口添加并开发了多孔粘弹性有限元本构模型，以此对单轴拉伸试验进行了模拟，通过与试验结果的对比分析验证了扩展后的软件和材料库的可靠性和合理性。

2 本构方程

D 为空心球形孔隙占分析物体的体积百分比，谓之孔隙率，是多孔材料损伤程度的一个重要的量化指标。在实际过程中，D 并不是一个常数。F.Xu 和 Sofronis 等人考虑了复合固体推进剂的近似不可压缩性，提出如下比较合理的影响控制方程：

$$\dot{D} = (1 - D)\dot{E}_{kk} \quad (1)$$

拉普拉斯变换域内的多孔线黏弹性本构方程表达式为

$$\bar{\mathbf{E}} = \frac{3A}{K} \bar{\boldsymbol{\Sigma}}' + \frac{2B}{3K} \bar{\boldsymbol{\Sigma}}_m \delta \quad (2)$$

式 (2) 中的应力偏量和平均应力的拉普拉斯变换形式可写成：

$$\bar{\boldsymbol{\Sigma}}' = \frac{K}{3A} \bar{\mathbf{E}}' = \frac{K}{3As} (s\bar{\mathbf{E}}' - \mathbf{E}'^0) + \frac{K}{3As} \mathbf{E}'^0 \quad (3)$$

$$\bar{\boldsymbol{\Sigma}}_m = \frac{K}{2B} \bar{E}_v = \frac{K}{2Bs} (s\bar{E}_v - E_v^0) + \frac{K}{2Bs} E_v^0 \quad (4)$$

其中， \mathbf{E}' 是应变偏量； $E_v = E_{kk}$ ，是体积应变。带上标“0”的物理量表示 $t=0$ 时的值。

对式 (3) 和 (4) 求拉普拉斯反变换，并运用卷积公式得：

$$\boldsymbol{\Sigma}'(t) = f(t)\mathbf{E}'^0 + \int_0^t f(\xi) \frac{d\mathbf{E}'(t-\xi)}{d\xi} d\xi \quad (5)$$

$$\Sigma_m(t) = g(t)E_v^0 + \int_0^t g(\xi) \frac{dE_v(t-\xi)}{d\xi} d\xi \quad (6)$$

其中, $f(t) = L^{-1}(\frac{K}{3A_s})$, $g(t) = L^{-1}(\frac{K}{2B_s})$, L^{-1} 表示拉普拉斯反变换。通过拉普拉斯反变换后, $f(t)$ 和 $g(t)$ 的表达式可写成如下形式:

$$f(t) = f_\infty + f_1 e^{-t/\tau_1} + f_2 e^{-t/\tau_2} + f_3 e^{-t/\tau_3} \quad (7)$$

$$g(t) = g_\infty + g_1 e^{-t/\tau_g} \quad (8)$$

其中, $\tau_1 = \tau$; τ_2 和 τ_3 都是 D, μ^p, μ^v, K, τ 的复杂函数。 $f_\infty, f_1, f_2, f_3, g_\infty, g_1$ 和 τ_g 也都是 D, μ^p, μ^v, K, τ 的复杂函数。

对式 (5) 和式 (6), 令 $u = t - \zeta$, 代入式 (5) 和式 (6) 得:

$$\Sigma'(t) = f_0 \mathbf{E}'(t) - \sum_{i=1}^3 f_i \int_0^t [1 - e^{-(t-\zeta)/\tau_i}] \frac{d\mathbf{E}'(\zeta)}{d\zeta} d\zeta \quad (9)$$

$$\Sigma_m(t) = g_0 E_v(t) - g_1 \int_0^t [1 - e^{-(t-\zeta)/\tau_g}] \frac{dE_v(\zeta)}{d\zeta} d\zeta \quad (10)$$

式 (9) 和式 (10) 便是多孔线黏弹性材料本构方程的遗传积分形式。式中, $f_0 = f(0)$, $g_0 = g(0)$ 。

为了方便将本构方程写入到程序中, 需要对遗传积分形式的本构方程进行化简和处理。

首先, 将应变率作线性化处理, 即令 $\dot{\mathbf{E}} = \frac{\Delta \mathbf{E}}{\Delta t}$, 再就方程 (9) 和 (10) 对应变张量求偏导, 通过一系列化简得到:

$$\frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial \mathbf{E}_{kl}} = \frac{\partial \Sigma'_{ij}}{\partial \mathbf{E}_{kl}} + \frac{\partial \Sigma_m}{\partial \mathbf{E}_{kl}} \delta_{ij} \quad (11)$$

式中,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma'_{ij}}{\partial \mathbf{E}_{kl}} = & (1 - D_n) e^{-\Delta E_v} \left(\frac{\partial f_0}{\partial D} \mathbf{E}'_{kl} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f_i}{\partial D} \mathbf{T}_{kl}^i \right) \delta_{ij} + \\ & \left\{ f_0 - \sum_{i=1}^3 f_i \left[1 + \left(e^{-\frac{\Delta t}{\tau_i}} - 1 \right) \frac{\tau_i}{\Delta t} \right] \right\} \mathbf{K}_{ijkl} \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma_m}{\partial \mathbf{E}_{kl}} = & (1 - D_n) e^{-\Delta E_v} \left(\frac{\partial g_0}{\partial D} E_v - \frac{\partial g_1}{\partial D} H \right) \delta_{kl} + \\ & \left\{ g_0 - g_1 \left[1 + \left(e^{-\frac{\Delta t}{\tau_g}} - 1 \right) \frac{\tau_g}{\Delta t} \right] \right\} \delta_{kl} \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{n+1}^i = & (1 - e^{-\Delta t/\tau_i}) \mathbf{E}'_n + e^{-\Delta t/\tau_i} \mathbf{T}_n^i + \\ & \left[1 + \left(e^{-\Delta t/\tau_i} - 1 \right) \frac{\tau_i}{\Delta t} \right] \Delta \mathbf{E}' \end{aligned} \quad (14)$$

$$H_{n+1} = (1 - e^{-\Delta t/\tau_g})E_v|_n + e^{-\Delta t/\tau_g}H_n + [1 + (e^{-\Delta t/\tau_g} - 1)\frac{\tau_g}{\Delta t}]\Delta E_v \quad (15)$$

式中，D 表示空穴率，右下标表示时间步。

3 用户子程序的编写

有限元软件 ABAQUS 的用户子程序 (UMAT) 通过与求解器 Standard 的接口来实现数据交流。在所有的高斯积分点上， t_n 时刻的 (E_n, Σ_n, D_n) 和 t_{n+1} 时刻的应变 $E_{n+1} = E_n + \Delta E$ 是已知的，要求得到 t_{n+1} 时刻的 (Σ_{n+1}, D_{n+1}) 。

本文编写的用户子程序中包含 20 个过程变量 (SDV)，在 inp 文件中关键词为 *DEPVAR；同时还应给定其中过程变量 D 的初始值， $D_0 = 0.01$ ，关键词为 *initial conditions, type=solution。由于求解得到 DDSDDDE 为非对称矩阵，因此还应在关键词 *user material，后加上 (unsymm)。

4 推进剂单轴拉伸试验

在常温下，将推进剂试件进行如下方式的加载：加载方式为力控制，在 1 秒内将载荷增加至 10N，并持续 20 秒。

上述试验属于应力加载模式的复合固体推进剂单向拉伸试验，旨在反映复合固体推进剂的蠕变特性。让力持续拉伸推进剂共计 20 秒，目的一是让推进剂的蠕变特性表现得更为明显些，二是让复合固体推进剂的空穴演化的效果更为明显些。下面给出实验值、ABAQUS 粘弹材料数值仿真解和本文编写的用户子程序数值解之间的位移——时间对比图 (图 1)：

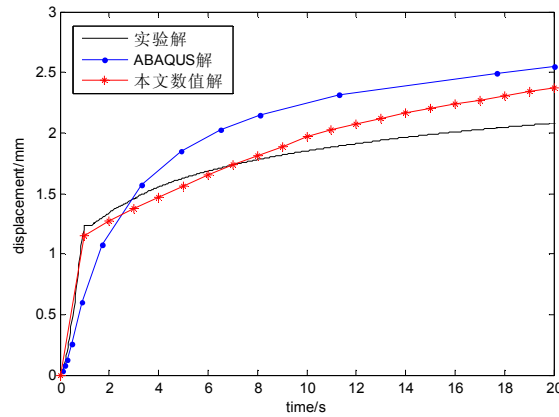


图 1 复合固体推进剂单向应力拉伸条件下的位移——时间图

从 ABAQUS 解的情况来看，其数值解也表现出明显的蠕变特性，但是从整体上看，其数值解都比实验值偏大，最大相对误差大约 15% 以内，这是因为 ABAQUS 采用的粘弹性本构方程是线粘弹性且不考虑空穴等损伤的本构方程，尚不能非常真实和准确地表现复合固体推进剂的特性。而本文的数值解，虽然是建立在线粘弹性本构方程的基础上，但是由于考虑了空穴的生成和演化以及对复合固体推进剂力学性能参数的影响，总体上比 ABAQUS 更接近实验曲线，最大相对误差在 10% 以内。另外，需要指出的是，由于实验仪器控制上的误差，在定力持续拉伸的 19 秒当中，定常力并不能保证在理想的 10N，其平均值只能保证在 9.6N 左右，因此，准确实验值应该比现在的实验值偏大一点。由于本文中采用的含孔穴粘弹性本构，只适用于小变形情况，且没有考虑推进剂“脱湿”而导致的孔穴率增多的影响，与实验结果有些偏差。

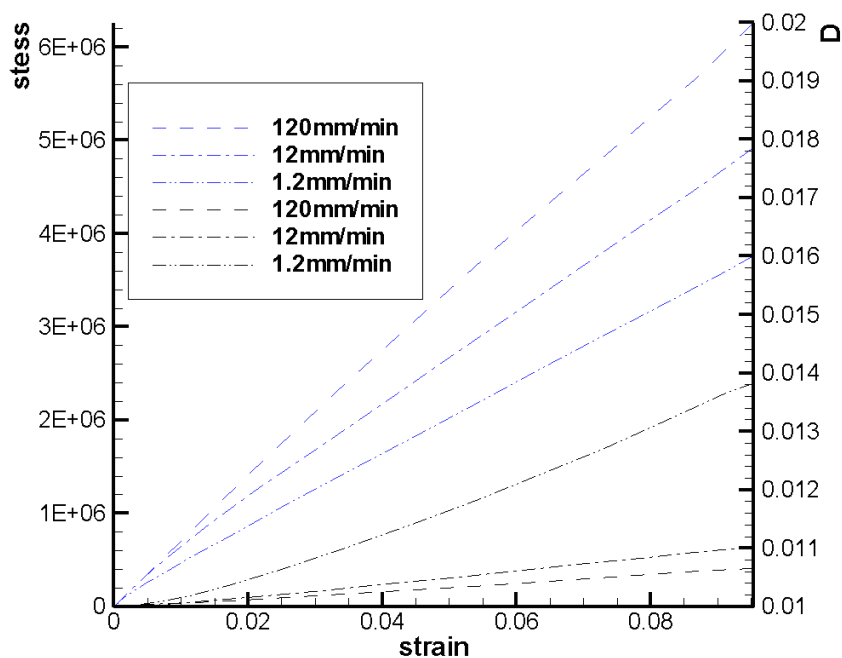


图 2 单轴拉伸应力—应变和孔穴率应变曲线

图 2 中看出随着拉伸速率的增大，相同应变条件下应力值增大，这符合推进剂这种颗粒填充材料的特性。而随拉伸速率的增大，孔穴率的变化呈现相反的趋势，且应变速率越小这种趋势越明显。这种现象出现是由于：孔穴率的增多和聚集不仅是受力、形变和消耗能量的过程，而且需要有充分的时间才能完成。如果拉伸速率很快，即使材料中的应力已相当高，但由于裂纹尚未来得及发展，大部分材料是不含裂纹的，所以材料仍可以承载而不破坏；但是如果拉伸速率很慢，则孔穴发展、汇集，材料中含孔穴的部分变多了，因此，材料变得不能承载而破坏。

5 结论

通过复合固体推进剂标准试件的单向拉伸试验和 ABAQUS 软件的数值解验证了含空穴缺陷的粘弹性本构方程的正确性和本文开发的用户子程序的正确性；然后，将该用户子程序运用于复合固体推进剂的工程计算进行试验验证，结果表明本代码的正确性。但由于本文中采用的含孔穴粘弹性本构，只适用于小变形情况，且没有考虑推进剂“脱湿”而导致的孔穴率增多的影响，与实验结果有些偏差。通过对应力应变曲线和孔穴率应变曲线的计算，得到结果符合推进剂的特性。

参考文献

- [1] Hibbit, Karlson and Sorrenson. ABAQUS user's manual[M]. Pawtucket, RI, USA. 2002
- [2] F. Xu, P. Sofronis, N. Aravas, S. Meyer, Constitutive modeling of porous viscoelastic materials, European Journal of Mechanics A/Solids 26 (2007) 936–955
- [3] 曾甲牙，丁羟推进剂拉伸断裂行为的扫描电镜研究，固体火箭技术，1999,22(4)
- [4] 王亚平，王北海，丁羟推进剂拉伸脱湿的电子显微镜观测，固体火箭技术，1999,21(2)
- [5] Liu C T, Crack growth in a solid propellant. Engineering Fracture Mechanics, 1997, 56(1):127~135