

文章编号:1000-8055(2013)10-2370-06

# 基于细观颗粒夹杂模型的复合固体推进剂 松弛模量预测

张建伟<sup>1</sup>, 职世君<sup>2</sup>, 孙冰<sup>1</sup>

(1. 北京航空航天大学 宇航学院, 北京 100191;

2. 中国空空导弹研究院 第四研究所, 河南 洛阳 471009)

**摘 要:** 为更准确地预测不同固体颗粒体积分数的复合固体推进剂的松弛模量, 采用了分子动力学方法对不同体积分数的复合固体推进剂细观模型进行建模. 根据有限元理论及细观力学均匀化方法, 计算在定应变工况下复合固体推进剂细观模型的平均应力随时间的变化, 从而有效地预测复合固体推进剂的松弛模量. 该方法有效地体现了随填充颗粒体积分数的增大, 复合固体推进剂瞬时模量逐渐增大的变化规律及颗粒随机分布对复合固体推进剂瞬时模量的影响. 将其应用到复合固体推进剂的设计过程中, 可有效降低设计成本, 缩短设计周期.

**关键词:** 复合固体推进剂; 细观力学; 松弛模量; 有限元方法; 均匀化方法; 黏弹性材料

中图分类号: V435

文献标志码: A

## Estimation of relaxation modulus of composite solid propellant based on particle packing model

ZHANG Jian-wei, ZHI Shi-jun, SUN Bing

(1. School of Astronautics,

Beijing University of Aeronautics and Astronautics, Beijing 100191, China;

2. 4th Institute, China Airborne Missile Academy, Luoyang Henan 471009, China)

**Abstract:** To estimate more accurately the relaxation modulus of composite solid propellant with different particles volume fraction, the molecular dynamics method was adopted to construct solid propellant meso-scale models with different particle volume fraction. The mean stress of composite solid propellant meso-scale model varying with relaxation time was computed by finite element theory and mesomechanics homogenization method when the model was under a fixed strain load. So the effective relaxation modulus of composite solid propellant can be estimated. It can be seen clearly that the instantaneous modulus of composite solid propellant increases when particle volume fraction becomes larger and the influence of particles random distribution to the instantaneous modulus of composite solid propellant by the proposed method. When this method is applied to the design process of composite solid propellant, it can reduce the design cost and shorten the design cycle effectively.

**Key words:** composite solid propellant; mesomechanics; relaxation modulus; finite element method; homogenization method; viscous-elastic material

收稿日期: 2012-09-24

网络出版地址:

基金项目: 航天科技创新基金(CASC201103)

作者简介: 张建伟(1976—), 男, 河南浚县人, 讲师, 博士, 主要研究方向为固体火箭发动机。

在固体火箭发动机的设计过程中,为满足固体火箭总体部门对发动机提出的要求,发动机设计者必须选择一种能量性能与力学性能符合要求的固体推进剂及合理的装药药型.再根据使用条件和受载情况对所设计的装药进行结构完整性分析,以鉴定固体推进剂力学性能是否符合要求.如果设计的固体推进剂力学性能不能满足设计要求,则需要对固体推进剂的配方进行调整或研究新的配方.在整个设计阶段,发动机的设计与推进剂配方的调整或研制是平行进行的,需要进行多次的协调,最后才能够设计出满足要求、性能良好的固体火箭发动机.每一次固体推进剂配方的调整,都需要重新进行大量的试验研究来确定固体推进剂的力学性能,耗资较大且研究周期较长.复合固体推进剂是一种多相(基体、增强相、界面相等)复合材料.松弛模量是计算复合固体推进剂药柱结构完整性的一个重要参数,受固体颗粒体积分数及其组分材料性质的影响较大,但同时也取决于其细观结构特征,这些特征包括增强相的分布规律、形状及界面相的性质等.因此,从细观尺度出发研究复合固体推进剂的力学性能已成为一种极其有效的途径.在固体火箭发动机的设计过程中,采用细观尺度的数值仿真试验可以有效预测不同配方的复合固体推进剂的力学性能,从而有效地降低试验耗资和缩短设计周期.

20 世纪 60 年代以来,随着复合材料的发展及广泛应用,人们迫切需要有一个理论来确定由两种或多种材料构成的复合材料如何确定各相所占比例才能达到最好的刚度、热物理特性等宏观性能.比较成熟的理论有:Eshelby<sup>[1]</sup>提出的等效夹杂理论,通过等效方程和 Eshelby 张量计算了含夹杂复合材料的等效模量.Hill 与 Budiansky<sup>[2-3]</sup>采用自洽方法研究了夹杂体积含量较高的复合材料的等效模量,成功地预测了多晶体的宏观力学性能.Mori 与 Tanaka<sup>[4]</sup>在等效夹杂方法的基础上提出以背应力考虑不同夹杂之间的相互作用,得到了等效模量的显式表达,即 Mori-Tanaka 方法.除此之外,广义自洽理论和微分法也对研究复合材料宏观力学性能提供了有力的工具.这几种方法为便于理论推导,对复合材料做了多种简化假设,不能够考虑复合材料的实际情况,如材料夹杂的非均匀性分布、材料夹杂之间的互相影响等.

随着计算机的发展,有限元计算细观力学逐渐成为计算细观力学的一种主要方法,该方法能够通过夹杂直径尺度下的完整应力、应变场来反

映复合材料的宏观应力、应变特征,可以分析宏观有效性能对复合材料细观结构的依赖关系.这种计算方法可以定量地描述夹杂的形状、尺寸、分布和体积分数等细观结构参量对宏观力学性能的影响,有助于复合材料细观结构的设计. Matous 等<sup>[5]</sup>利用他们自主开发的软件 Rocpack 生成了固体推进剂代表性体积单元模型,并介绍了关于细观模型二维和三维问题的网格划分方法,以及均匀化理论.他们在固体颗粒和基体之间设置了黏结单元(cohesive element)来模拟固体颗粒和基体之间损伤的产生及发展.随后,Matous 等<sup>[6]</sup>建立了 1 个或 4 个超弹性颗粒嵌入超弹性基体的简单细观模型,颗粒与基体界面仍采用黏结单元模型,结合 Mori-Tanaka 方法研究了该模型所表现的宏观力学性能.Tan 等<sup>[7-8]</sup>根据试验研究的得到的颗粒与基体之间的非线性黏结模型,对含不同尺寸颗粒的细观模型进行了数值计算.由于复合固体推进剂一般颗粒体积分数较高,数值仿真时往往遇到建模困难、网格不易划分、计算不易收敛等问题.国内一些学者采用了数值仿真与 Mori-Tanaka 结合的方法、多步法等方法简化了计算模型或者直接对体积分数较低的模型进行了有限元计算<sup>[9-12]</sup>来研究复合固体推进剂的力学性能.

本文根据分子动力学方法对不同颗粒体积分数的复合固体推进剂细观模型进行了建模,结合有限元方法及细观力学均匀化方法,预测了不同颗粒体积分数的复合固体推进剂的松弛模量.

## 1 物理模型和均匀化方法

采用完全计算细观力学方法预测复合固体推进剂的宏观松弛模量,首先要建立该推进剂的代表性体积单元.根据 Hashin<sup>[13]</sup>提出代表性体积单元是一个可以完全描述材料宏观性能模型,一方面,相对于材料的细观结构,其尺寸足够大,包含足够的材料结构信息;另一方面,从宏观上讲其尺寸足够小,可以看作一个材料质点,即众所周知的微观—细观—宏观准则.因此,在本文中针对复合固体推进剂建立适当的细观模型,利用有限元法计算细观模型在一定的轴向应变作用的力学响应.再通过均匀化方法计算细观模型的平均应力、应变随时间的变化,从宏观上将其考虑为一个质点,根据线性黏弹性材料本构方程,最后得到复合固体推进剂的宏观松弛模量.

### 1.1 细观模型

根据文献[14]中所提出的分子动力学方法编

写程序. 取大颗粒粒径与小颗粒粒径之比为 3.4444, 计算大颗粒和小颗粒所占比例不同时所能达到的最大体积分数, 并将计算结果与文献 [14] 进行对比, 如图 1 所示. 从图中可以看出, 本文计算结果与文献 [14] 的计算结果及试验结果吻合良好, 说明了本文所编写的程序合理可行.

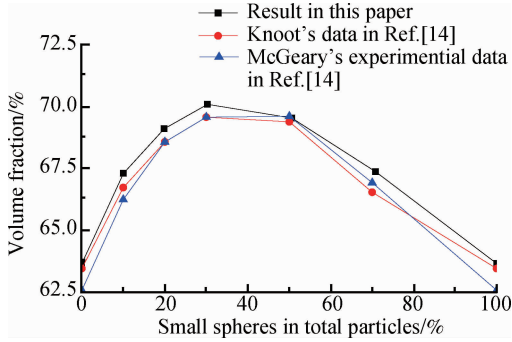


图 1 颗粒最大体积分数试验及仿真结果  
Fig. 1 Results of particles' maximum volume fraction from experiment and simulations

所研究的复合固体推进剂由高氯酸铵 (AP) 和基体组成, 其中 AP 的体积分数为 79%, AP 颗粒等效粒径为 150 μm, 具体粒径分布参考文献 [15]. 为考虑颗粒随机分布的影响, 采用分子动力学方法对该推进剂进行 3 次建模, 如图 2 所示.

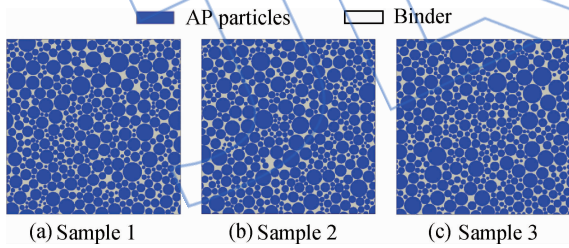


图 2 AP 体积分数为 79% 复合固体推进剂细观模型  
Fig. 2 Meso-scale model of composite solid propellant models with 79% AP volume fraction

为研究颗粒体积分数对复合固体推进剂松弛模量的影响, 采用于图 2 中相同的粒径分布, 分别对 AP 体积分数为 50%, 55%, 60%, 65%, 70%, 75% 的复合固体推进剂细观模型进行建模, 每一种推进剂建立 3 个细观模型, 如图 3 所示.

1.2 各组份材料属性

固体推进剂基体具备黏弹性材料的基本性质, 属于橡胶材料范围, 是导致固体推进剂具有黏弹性的根本原因. 因此, 在计算过程中要充分考虑固体推进剂基体的材料特性. 根据某推进剂基体的应力松弛试验, 假设基体满足线黏弹性本构方

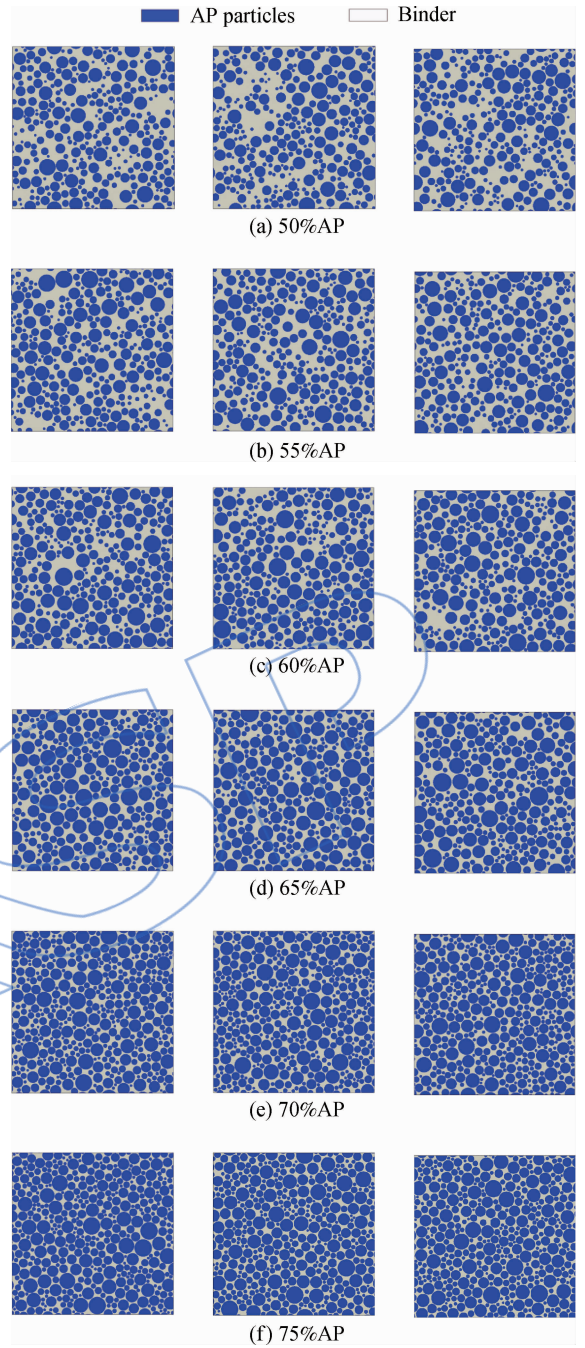


图 3 不同 AP 体积分数的复合固体推进剂细观模型  
Fig. 3 Meso-scale of composite solid propellant models with different AP volume fraction

程, 其松弛模量表达式为

$$E(t) = E_0 (\alpha_0 + \alpha_1 e^{-t} + \alpha_2 e^{-\frac{t}{\tau_1}} + \alpha_3 e^{-\frac{t}{\tau_{100}}} + \alpha_4 e^{-\frac{t}{\tau_{1000}}}) \tag{1}$$

式中  $E_0$  为瞬时模量,  $t$  为松弛时间. 根据式 (1) 拟合其松弛模量曲线 [16], 如图 4 所示.

根据文献 [5], 假设 AP 颗粒为弹性体, 取其弹性模量和泊松比分别为:  $E = 32450 \text{ MPa}$ ,  $\nu = 0.1433$ .

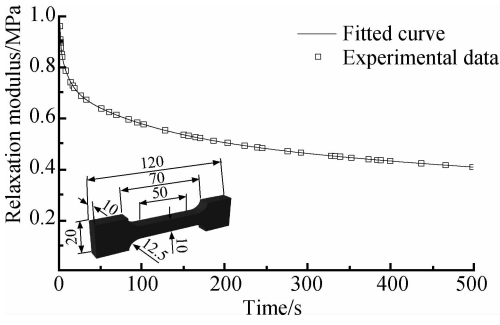


图 4 复合固体推进剂基体松弛模量曲线 (单位:mm)

Fig. 4 Experimental data and fitted curve of binder of composite solid propellant (unit:mm)

### 1.3 均匀化方法

在进行有限元计算时,采用 3 节点单高斯积分点的三角形单元和 4 节点 4 高斯积分点的四边形单元对复合固体推进剂细观模型进行网格划分,如图 5 所示.复合固体推进剂细观模型的平均应力和平均应变可根据每个单元的平均应力和平均应变来计算.

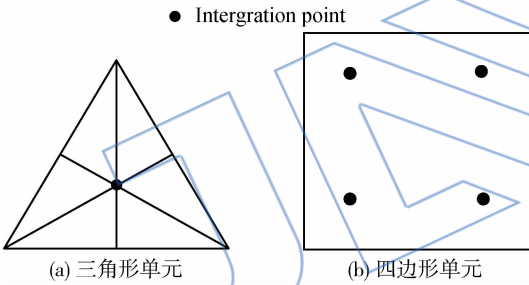


图 5 三角形和四边形单元示意图

Fig. 5 Sketches of triangular and quadrangle element

$$\bar{\sigma}_{ij} = \sum_{m=1}^{N_{tri}} \bar{\sigma}_m^{tri} \frac{S_m^{tri}}{S_{rve}} + \sum_{n=1}^{N_{quad}} \bar{\sigma}_n^{quad} \frac{S_n^{quad}}{S_{rve}} \quad (2)$$

$$\bar{\epsilon}_{ij} = \sum_{m=1}^{N_{tri}} \bar{\epsilon}_m^{tri} \frac{S_m^{tri}}{S_{rve}} + \sum_{n=1}^{N_{quad}} \bar{\epsilon}_n^{quad} \frac{S_n^{quad}}{S_{rve}} \quad (3)$$

其中  $N_{tri}$  和  $N_{quad}$  分别是三角形单元及四边形单元的数目,  $\bar{\sigma}_m^{tri}$  ( $\bar{\epsilon}_m^{tri}$ ) 和  $\bar{\sigma}_n^{quad}$  ( $\bar{\epsilon}_n^{quad}$ ) 分别是单个三角形单元及四边形单元的平均应力(平均应变),  $S_m^{tri}$  和  $S_n^{quad}$  分别是第  $m$  个三角形单元和第  $n$  个四边形单元的面积,  $S_{rve}$  是整个细观模型的面积.

根据有限元计算理论,单个三角形单元的平均应力为

$$\bar{\sigma}_m^{tri} = \sigma_{ij}^i \quad (4)$$

$$\bar{\epsilon}_m^{tri} = \epsilon_{ij}^i \quad (5)$$

其中  $\sigma_{ij}^i$ ,  $\epsilon_{ij}^i$  为三角形单元高斯积分点的应力和应变. 单个四边形单元的平均应力和平均应变分别为

$$\bar{\sigma}_n^{quad} = \int_S \bar{\sigma}_{ij} dS = \sum_I \bar{\sigma}_{ij}^i |J(I)| W(I) \quad (6)$$

$$\bar{\epsilon}_n^{quad} = \int_S \bar{\epsilon}_{ij} dS = \sum_I \bar{\epsilon}_{ij}^i |J(I)| W(I) \quad (7)$$

其中  $W(I)=1$ ,  $J(I)$  为雅可比矩阵.

## 2 计算结果与讨论

对所研究的复合固体推进剂细观模型施加 2% 轴向的定应变载荷,利用有限元法计算模型的应力松弛.计算图 2 中所示的含 AP 体积分数为 79% 的细观模型在应力松弛 500 s 时的应力、应变分布,其中 sample 1 的轴向应力、应变分布如图 6 所示.

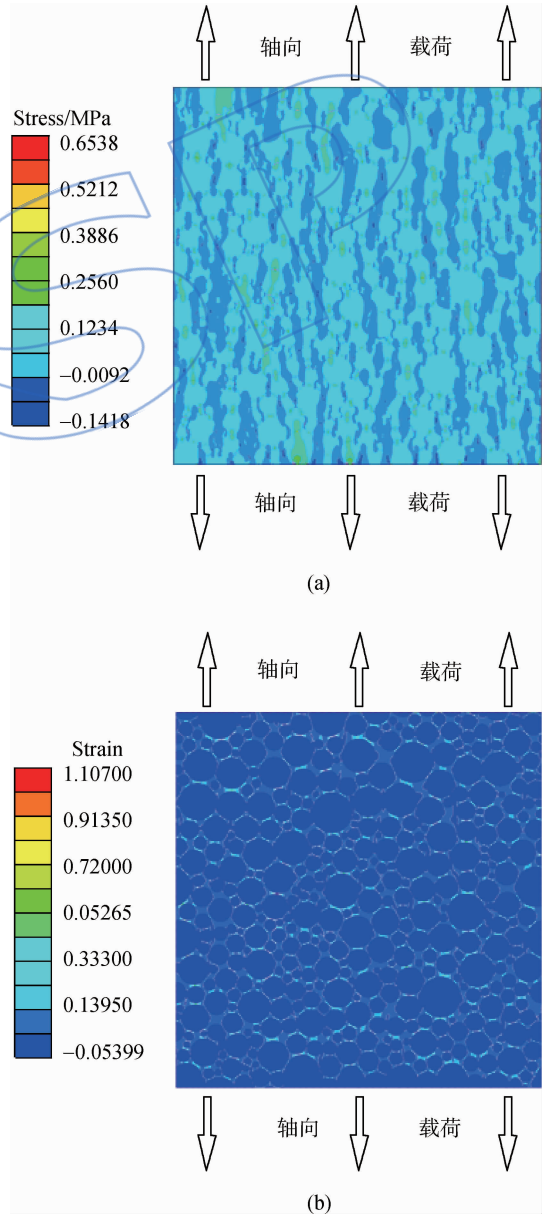


图 6 Sample 1 的应力、应变分布

Fig. 6 Distributions of stress and strain of sample 1

从图 6 中可以看出:在轴向拉伸载荷下,应力呈条状分布,在颗粒与颗粒之间的应力和应变值较大,特别是大颗粒周围应力和应变值稍高.这说明在大颗粒周围更容易发生脱湿损伤和基体断裂.

采用均匀化方法,计算图 2 中 3 个模型的平均应力和平均应变,可根据

$$E(t) = \frac{\bar{\sigma}(t)}{\bar{\epsilon}(t)} \quad (8)$$

求得模型的松弛模量,如图 7 所示.

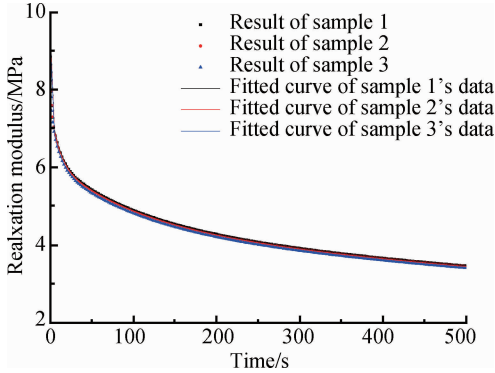


图 7 图 2 中所示复合固体推进剂细观模型的松弛模量

Fig. 7 Relaxation modulus of composite solid propellant meso-scale model in Fig. 2

从图 7 中可以看出,3 个模型所计算的松弛模量曲线非常接近,并且曲线形状与图 4 中基体的松弛模量曲线非常相似.根据线黏弹性松弛模量表达式,即式(1),对图 7 中所计算的松弛模量曲线进行拟合.根据拟合结果可以发现,图 7 中所示曲线与图 4 中所示基体的松弛模量曲线的主要差别在于瞬时模量  $E_0$  的不同,其他参数是一致的,即曲线的形状是一致的.说明 AP 颗粒的填充起到的增强作用主要体现在  $E_0$  的变化上.

分别对图 3 中所示不同 AP 颗粒体积分数的复合固体推进剂细观模型进行计算,并进行曲线拟合.复合固体推进剂的  $E_0$  的分布,如图 8 所示.

图 8 中实线为不同体积分数的复合固体推进剂细观模型的平均瞬时模量连线.从图中可以看出,由于颗粒随机分布的影响,同一体积分数的复合固体推进剂的不同细观模型所计算的瞬时模量略有差异,但变化很小.这说明在预测复合固体推进剂松弛模量时,本文所选的复合固体推进剂代表性体积单元大小是合适的,可以体现出复合固体推进剂的宏观均匀性特征.随着颗粒体积分数的增加,颗粒的增强效应越明显,复合固体推进剂的瞬时模量增加的速度逐渐变大.

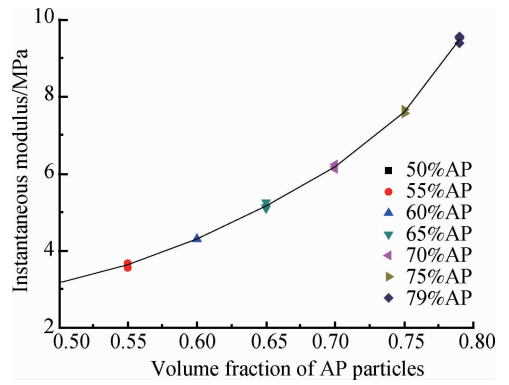


图 8 不同 AP 颗粒体积分数的复合固体推进剂瞬时模量

Fig. 8 Instantaneous modulus of composite solid propellant with different AP particles' volume fraction

### 3 结 论

1) 采用分子动力学对复合固体推进剂细观模型进行建模,结合有限元计算结果及均匀化处理可以有效地预测不同颗粒体积分数的复合固体推进剂的松弛模量,可以对复合固体推进剂的设计提供一定的参考.

2) 基体材料为线性黏弹性材料时,复合固体推进剂的松弛模量曲线与基体的松弛模量曲线形状一致,颗粒的增强作用主要体现在瞬时模量  $E_0$  上.随着颗粒体积分数的增加,固体推进剂的瞬时模量逐渐增大且增加的速度不断变大,即颗粒体积分数越大,颗粒的增强效应越明显.

### 参考文献:

- [1] Eshelby J D. The elastic field outside an ellipsoidal inclusion[J]. Proceedings of the Royal Society of London: Series A Mathematical and Physical, 1959, 252 (1271): 561-569.
- [2] Hill R. A self-consistent mechanics of composite materials [J]. Journal of the mechanics and physics of solids, 1965, 13(4): 213-222.
- [3] Budiansky B. On the elastic moduli of some heterogeneous materials[J]. Journal of the mechanics and physics of solids, 1965, 13(4): 223-227.
- [4] Mori T, Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusion[J]. Acta Metallurgica, 1973, 21(5): 571-574.
- [5] Matous K, Inglis H M, Gu X F, et al. Multiscale damage modeling of solid propellants: theory and computational framework[R]. AIAA 2005-4347, 2005.
- [6] Matous K, Geubelle P H. Multiscale modeling of particle debonding in reinforced elastomers subjected to finite de-

- formation[J]. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2006, 65(2): 190-223.
- [7] 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(8): 1892-1917.
- [8] Tan H, Huang Y, Liu C, et al. The uniaxial tension of particulate composite materials with nonlinear interface debonding[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2007, 44(6): 1809-1822.
- [9] 李高春, 邢耀国, 王玉峰, 等. 基于细观力学的复合固体推进剂模量预估方法[J]. *推进技术*, 2007, 28(4): 441-444.  
LI Gaochun, XING Yaoguo, WANG Yufeng, et al. A micro-mechanical method of the effective modulus estimation for the composite propellant [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2007, 28(4): 441-444. (in Chinese)
- [10] 曲凯, 张旭东, 李高春. 基于内聚力界面脱粘的复合固体推进剂力学性能研究[J]. *火炸药学报*, 2008, 31(6): 77-81.  
QU Kai, ZHANG Xudong, LI Gaochun. Research on mechanical performance of composite propellant with cohesive interface debonding[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2008, 31(6): 77-81. (in Chinese)
- [11] 马昌兵, 强洪夫, 武文明, 等. 颗粒增强复合材料有效弹性模量预测的多步法[J]. *固体力学学报*, 2010, 31(suppl.): 12-16.  
MA Changbing, QIANG Hongfu, WU Wenming, et al. Multi-step method for effective elastic properties prediction of composite material [J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2010, 31(suppl.): 12-16. (in Chinese)
- [12] 刘承武, 阳建红, 陈飞. 改进的 Mori-Tanaka 法在复合推进剂非线性界面脱粘中的应用[J]. *固体火箭技术*, 2011, 34(1): 67-70.  
LIU Chengwu, YANG Jianhong, CHEN Fei. An improved Mori-Tanaka method for nonlinear interface debonding in composite solid propellant [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2011, 34(1): 67-70. (in Chinese)
- [13] Hashin Z. Analysis of composite materials—a survey[J]. *Journal of Applied Mechanics*, 1983, 50(3): 481-505.
- [14] Knott G M, Jackson T L, Buckmaster J. Random packing of heterogeneous propellants[J]. *AIAA Journal*, 2001, 39(4): 678-686.
- [15] Kochevets S, Buckmaster J, Jackson T L, et al. Random packs and their use in modeling heterogeneous solid propellant combustion[J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2001, 17(4): 883-891.
- [16] Zhi S J, Sun B, Zhang J W. Multiscale modeling of heterogeneous propellants from particle packing to grain failure using a surface-based cohesive approach[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2012, 28(3): 746-759.