

文章编号:1006-9941(2022)07-0736-08

拉伸载荷下PBX-9501裂纹产生的数值模拟

何各焱¹,刘占芳^{1,2},段连龙¹

(1. 重庆大学 航空航天学院, 重庆 400044; 2. 非均质材料力学重庆市重点实验室, 重庆 400044)

摘要: 高聚物黏结炸药(Polymer Bonded Explosive, PBX)是由占极大体积分数的单质炸药颗粒与少量高聚物黏结剂组成的多相复合材料,其中颗粒与黏结剂的界面脱粘以及细观结构是影响材料力学性能的重要因素。可以通过将随机模拟方法与Voronoi方法相结合,建立细观尺度下PBX材料的代表性体积元进行分析。但当颗粒为多级配时,该方案生成的模型大颗粒周围的颗粒呈条状散射形状,因此本研究在Voronoi方法的基础上改进了PBX细观结构的建模方法。首先根据PBX-9501颗粒与黏结剂的细观界面特性,采用三阶段黏结界面的本构关系,对PBX-9501材料在静态拉伸下颗粒与黏结剂界面的损伤演化进行数值模拟,获得的PBX-9501宏观力学性能与实验数据比较吻合,其次对使用有限元隐式静力分析时的收敛性与代表体积元尺寸之间的关系进行讨论,结果表明代表体积元尺寸越大则模拟界面脱粘的收敛性越差。

关键词: 高聚物黏结炸药;随机模型;Delaunay三角形;界面脱粘

中图分类号: TJ55; O34

文献标志码: A

DOI:10.11943/CJEM2021333

1 引言

PBX材料中占极大体积分数的单质炸药颗粒(通常可达90%以上)与高聚物黏结剂之间存在相互作用,力学响应较为复杂,从宏观角度准确描述PBX材料的性质和力学行为特征较为困难,因此采用细观结构表征技术以及与宏观力学性能相关联的研究方法是非常有效的研究手段^[1]。PBX所具有的含能敏感特性给力学性能的实验研究带来了困难,通过数值模拟方法来研究炸药的力学性能越来越受到人们的重视,如何建立符合实际PBX材料的细观结构模型是进行数值模拟的关键。

国内外对PBX细观结构的几何建模研究主要是通过建立以材料细观结构为基础的数值模型^[2-3],证明

二维代表体积元方法的有效性^[4-5],这在一定程度上较好地预测了炸药颗粒的性质、体积分数、形状和级配以及黏结剂的性质等对有效弹性模量的影响^[6-7]。为了建立合适的PBX细观模型,许多研究者通过数字图像处理技术手动建立材料模型。Arora等^[8]通过对显微电子图像中不同相的识别建立了PBX细观结构模型,Manner等^[9]利用X射线对HMX-HTPB基的PBX炸药进行扫描,并在此基础上建立了PBX细观结构模型,但此方法需要昂贵的设备和时间成本。韦兴文等^[10]尝试利用随机投放方法建立PBX随机圆形颗粒模型,然而这种方法很难使炸药颗粒体积分数达到85%及以上。戴开达等^[6]为了提高PBX细观模型中炸药颗粒的体积分数,以规则的多边形炸药颗粒来替代圆形的炸药颗粒,但颗粒的不规则性以及随机分布性却无法保证。Guo等^[11-13]采用Voronoi方法建立了PBX细观模型,此时Thiessen多边形颗粒能够保证随机分布和体积分数的要求,但生成的颗粒尺寸过于均匀。康歌等^[14-17]利用随机模拟方法,在给定区域随机生成多种类型的圆形颗粒,再由各圆心生成Voronoi图建立PBX细观模型,该模型不仅能够反映级配,且能达到较高的颗粒体积分数,然而由大圆周围的小圆生成有规律的条状散射形状的Thiessen多边形,以及由大圆生

收稿日期: 2021-12-10; 修回日期: 2022-04-18

网络出版日期: 2022-04-25

基金项目: 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金(U1830115)

作者简介: 何各焱(1989-),男,硕士生。e-mail: hegeyi@cqu.edu.cn

段连龙(1995-),男,硕士生。e-mail: dlianlong@cqu.edu.cn

通信联系人: 刘占芳(1963-),男,教授,博士生导师。

e-mail: zhanfang@cqu.edu.cn

引用本文: 何各焱,刘占芳,段连龙. 拉伸载荷下PBX-9501裂纹产生的数值模拟[J]. 含能材料, 2022, 30(7):736-743.

HE Ge-yi, LIU Zhan-fang, DUAN Lian-long. Numerical Simulation of PBX-9501 Crack Generation Under Tensile Loading[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2022, 30(7):736-743.

成的 Thiessen 多边形面积明显变小,因此仍需要对模型进行修正。

大量的实验结果表明,在拉伸载荷作用下,PBX 的主要损伤形式为界面脱粘^[19],PBX 在拉伸下的断裂行为受到晶体间界面性质的显著影响^[20],但是界面属性很难描述。大多数研究是基于牵引力和开口位移之间关系为线性这一假设^[21-22],其中 Tan^[23]使用数字图像相关方法获得内聚力规律,并提出了三阶段黏结界面本构关系。

相较于三维模型,对二维模型进行数值模拟能够得到更加直观的结果并减少大量的计算量,得到的结果也具有一定的可靠性。用二维的平面模型来表征三维的实体结构时,通常是参考三维实体的截面几何分布,但值得注意的是二维截面并不一定是三维颗粒的最大截面,即截面中的颗粒面积大小并不能表征颗粒体积的大小。因此本研究将通过随机生成三级配圆,并采用大级配最大化方法,以达到所有圆面积总和最大化的目的,这与 PBX 压制工艺中采用级配以增加颗粒体积比的思想相一致。本研究基于 Voronoi 方法,对于 PBX 细观几何结构上的建模进行改进,建立更加符合实际的不同级配下晶粒分布的二维几何模型。在

此基础上建立二维代表体积元,采用三阶段黏结界面损伤本构关系,对含有细观结构的 PBX-9501 进行静态拉伸下的界面脱粘数值模拟,研究静态拉伸下颗粒与黏结剂界面力学行为。

2 具有细观结构特征的 PBX 几何建模

2.1 PBX 几何建模布种

运用随机模拟方法,在给定的区域生成 3 种类型的圆形颗粒,将所有圆称为种子,圆半径称为种子大小。每个种子除了位置坐标信息外,还有种子大小的信息。

运用 Matlab 软件,首先在 $S=1\text{ mm}\times 1\text{ mm}$ 区域内随机产生 $N=10^6$ 个点,由随机产生的点为圆心,以半径为 $r_1=50\text{ }\mu\text{m}$ 依次作圆,后产生的圆与之前的圆不能相交,且与之前产生的圆中至少存在一个满足(1)式关系:

$$L < \delta_1(r + r_1) \tag{1}$$

式中, L 为两圆之间的距离, r 为存在的圆的半径, δ_1 为控制参数,本研究中取值为 2,遍历所有的随机点。同理逐次产生 $r_2=12.5\text{ }\mu\text{m}$, $r_3=3\text{ }\mu\text{m}$ 的圆(控制参数同样取 2),分别在 S 区域内生成大种子 79 个,中种子 379 个,小种子 3534 个,如图 1 所示。

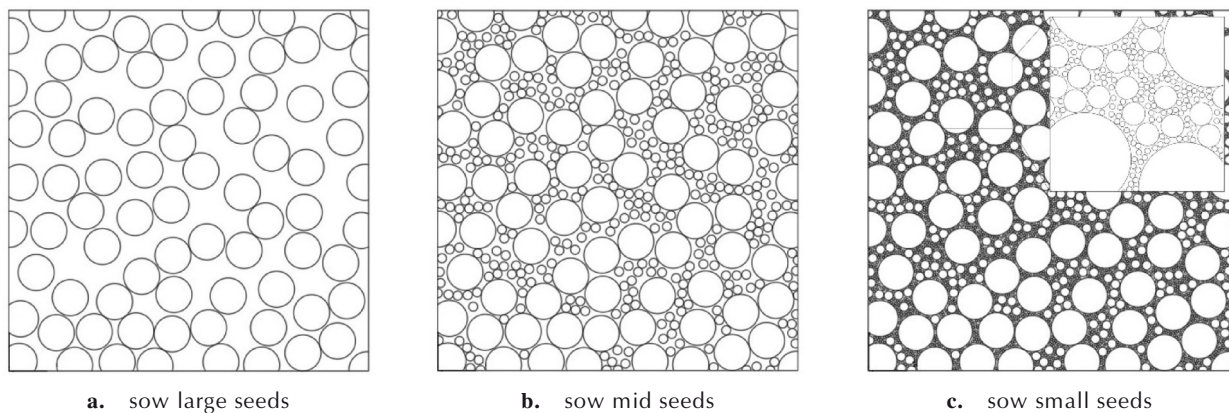


图 1 三级配颗粒逐步布种
Fig.1 Seed distribution of three graded particles gradually

2.2 生成 Voronoi 模型

由种子位置信息生成 Voronoi 图,在 Matlab 软件中生成 CAD 命令流文件,并将每一个 Thiessen 多边形缩放形成黏结剂层,缩放为向内偏移 $m/2=0.5\text{ }\mu\text{m}$,生成黏结剂厚度 $m=1\text{ }\mu\text{m}$ 的模型,如图 2 所示。由于颗粒采用的是三级配,而且 Voronoi 方法生成的模型只用到了种子的位置信息,所以明显可观测到由大种子生成的 Thiessen 多边形面积偏小,由大种子周围的小

种子生成 Thiessen 多边形成条状的散射状。

2.3 改进的几何模型

Thiessen 多边形的每个顶点对应 Delaunay 三角形的外心^[18],是由 3 个种子的位置信息确定。如图 3 所示,图 3a 中 O 点为修改前的顶点位置,图 3b 中 O 点为修改后的顶点位置,将每个顶点的位置进行修改,加入种子大小的信息,为了保证所得顶点仍然在三角形内部,并且顶点位置更加偏向小种子,采用面积加权来

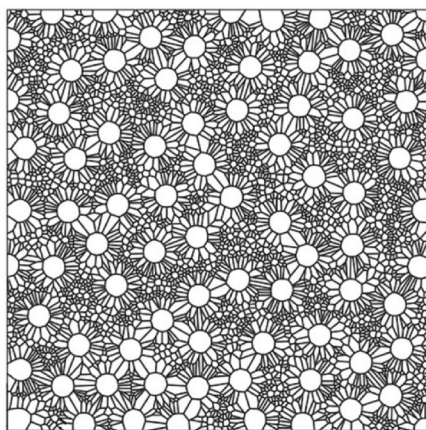


图2 Voronoi模型
Fig.2 Voronoi model

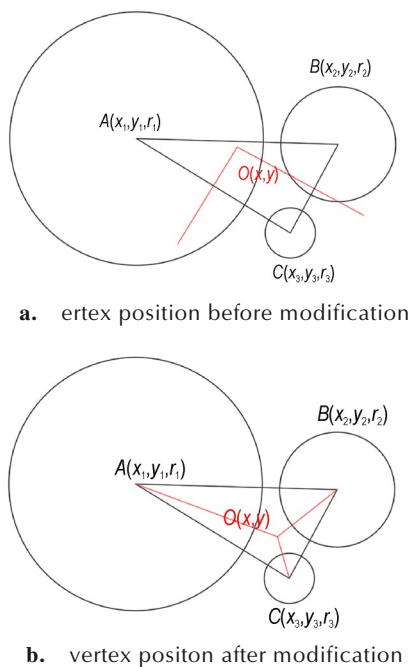


图3 在Delaunay三角形中重新生成多边形顶点
Fig.3 Regenerating polygon points in Delaunay triangles

重新确定多边形的顶点位置 O , 使得顶点与三角形组成的3个三角形的面积之间满足(2)式:

$$S_{OBC} : S_{OAC} : S_{OAB} = \frac{1}{r_1^2} : \frac{1}{r_2^2} : \frac{1}{r_3^2} \quad (2)$$

则可得顶点坐标为:

$$\begin{cases} x = \frac{1}{r_1^2} x_1 + \frac{1}{r_2^2} x_2 + \frac{1}{r_3^2} x_3 \\ y = \frac{1}{r_1^2} y_1 + \frac{1}{r_2^2} y_2 + \frac{1}{r_3^2} y_3 \end{cases} \quad (3)$$

由修改后的多边形同样缩放形成黏结剂层, 缩放为向内偏移 $m/2=0.5 \mu\text{m}$, 生成黏结剂厚度 $m=1 \mu\text{m}$

的模型, 如图4所示, 模型颗粒面积分数为90.5%, 黏结剂面积分数为9.5%。改进后的模型与种子的契合度明显提升, 颗粒为三级配时比Voronoi图模型更加符合PBX实际细观结构, 但仍存在大颗粒多边形趋于圆形的缺点。模型的颗粒分布如图5所示, 其中图5a为不同面积颗粒数量分布, 图5b为不同面积的颗粒面积分布, 从中可以得出模型具有小颗粒数量多、大颗粒与小颗粒面积占比相当、中颗粒面积占比最少的特征。

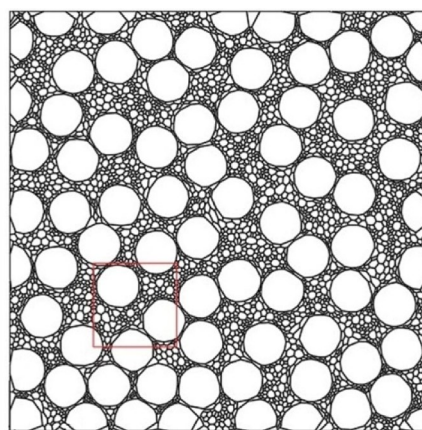
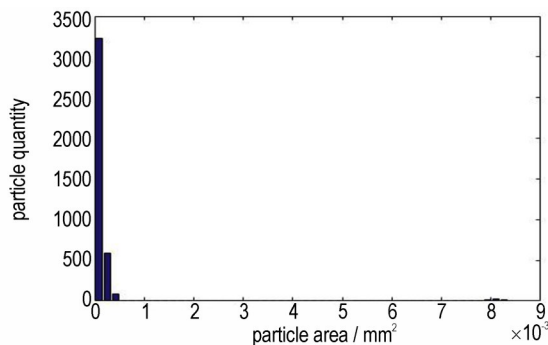
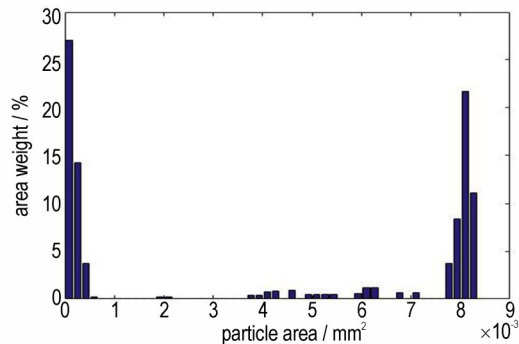


图4 改进后的模型
Fig.4 Improved model



a. distribution of particle quantity



b. distribution of particle area

图5 模型中的颗粒分布
Fig.5 Particle distribution in model

3 PBX-9501 静态拉伸下的界面脱粘数值模拟

3.1 有限元单元划分

采用有限元方法模拟 PBX-9501 在准静态拉伸下的断裂行为,所有仿真均在 Abaqus 软件中实现。选取模型中区域 0.2 mm×0.2 mm(图 4 中的红色区域),生成草图导入 Abaqus 建立几何模型,并作为 PBX-9501 周期性边界条件代表体积元,如图 6 所示。

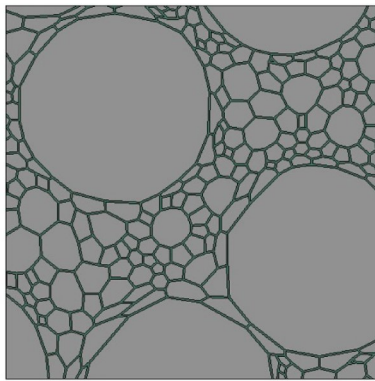


图 6 在 Abaqus 中建立模型

Fig.6 Modeling in Abaqus

网格和加载边界如图 7 所示。颗粒与黏结剂实体均采用三角形平面应变单元,约有 11000 个。在黏结剂内部及颗粒与黏结剂界面插入黏结面单元,约有 7000 个。左边界固定 x 方向位移,下边界固定 y 方向位移,在上边界加载 y 方向位移。

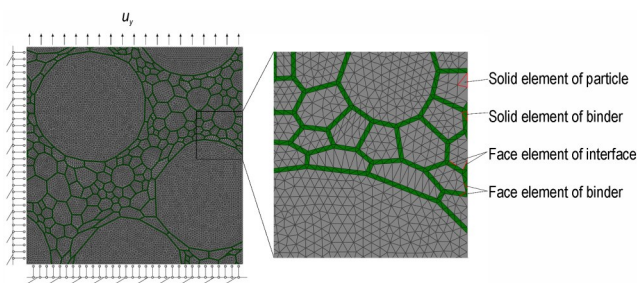


图 7 约束与载荷边界条件及网格划分

Fig.7 Boundary conditions and meshing

3.2 颗粒与黏结剂界面的本构模型

大量实验结果表明,在拉伸载荷作用下,PBX 的主要损伤形式为界面脱粘。PBX-9501 在拉伸下的细观裂纹路径如图 8 所示。由图 8 可见,在拉伸载荷作用下 PBX-9501 明显存在一条主裂纹路径,裂纹主要沿颗粒的边缘扩展^[19]。

PBX 在拉伸下的断裂行为受到晶体间界面性质的显著影响^[20],但是界面属性很难描述。大多数研究假

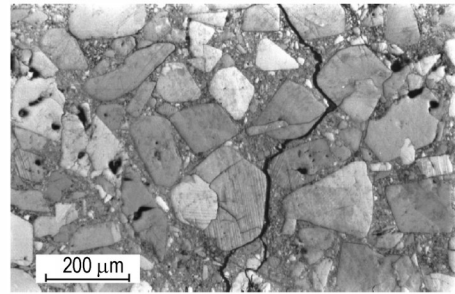


图 8 拉伸载荷下 PBX-9501 的微观裂纹路径^[19]

Fig.8 The microscopic crack path of PBX-9501 under tensile loading^[19]

设牵引力和开口位移之间的关系是线性的^[21-22],Tan^[23]使用数字图像相关方法获得内聚力规律,并提出了一个解析表达式。该表达式有 3 个参数:黏合强度最大值、刚度和退化刚度

$$\begin{cases} \sigma_{int} = k_{\sigma} [u_r] & [u_r] < \sigma_{max} / k_{\sigma} \\ \sigma_{int} = (1 + \bar{k}_{\sigma} / k_{\sigma}) \sigma_{max} - \bar{k}_{\sigma} [u_r] & \sigma_{max} / k_{\sigma} < [u_r] < \sigma_{max} / (1/k_{\sigma} + 1/\bar{k}_{\sigma}) \\ \sigma_{int} = 0 & \sigma_{max} / (1/k_{\sigma} + 1/\bar{k}_{\sigma}) < [u_r] \end{cases} \quad (4)$$

式中, σ_{int} 为界面法线应力, u_r 为开口位移。如图 9 所示,该关系由 3 个线性阶段组成。

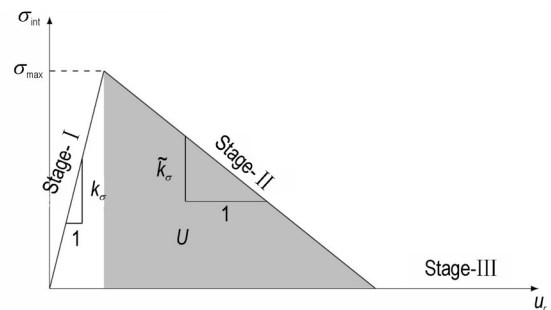


图 9 界面法向力与张开位移的关系

Fig.9 The relationship between the normal stress and the opening displacement of interface

在数值模拟中,由弹性实体单元与黏结面单元共同描述黏结剂力学行为,其中弹性实体单元描述第一阶段,黏结面单元描述第二、三阶段,如图 10 所示。

切向应力与切向位移的关系与法向关系相同。参考文献[24]中的参数选取,界面黏结强度为 1.66 MPa,刚度为 1.55 GPa·μm⁻¹,退化刚度为 17 MPa·mm⁻¹;黏

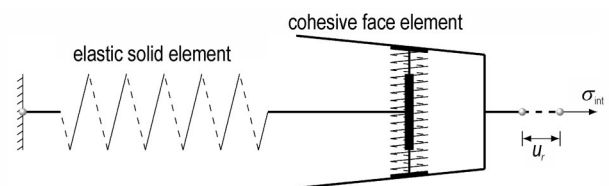


图 10 黏结剂层本构关系示意图

Fig.10 Diagram of the constitutive of the binder layer

结剂假定为线弹性, 弹性模量为 1 MPa, 泊松比为 0.499; 晶体颗粒假定为线弹性, 弹性模量为 30 GPa, 泊松比为 0.322。

4 结果与讨论

本研究通过随机生成三级配圆, 并采用大级配最大化方法, 建立了不同级配下晶粒分布的二维几何模型, 采用三阶段黏结界面损伤本构关系及有限元方法模拟了 PBX-9501 在准静态拉伸条件下无初始损伤模型的断裂过程。为了验证模拟的有效性, 将模拟得到的拉应力应变关系结果在图 11 中用实线表示, 将文献 [25] 中 PBX-9501 巴西圆盘实验数据在图 11 中用虚线表示, 对比表明: 在数值模拟与实验中具有几乎相同的拉伸强度和初始刚度, 但在数值模拟中明显存在一个较大的刚度退化阶段, 而实验结果的刚度退化不明显; 在数值模拟结果中曲线末端出现波动, 但实验曲线只有上升阶段而无下降阶段。分析产生差异的原因: 一是因为数值模拟的对象为代表性体积单元, 尺寸小, 单个微裂纹的产生对整个材料影响大, 而实验对象的尺寸很大, 单个微裂纹的产生对整个材料影响小, 所以在数值模拟中出现波动, 而实验中波动不明显; 二是采用静态加载方式, 数值模拟出现下降段是因为在该阶段有静态稳定解, 实验无下降段是因为在该阶段无静态稳定解, 裂纹产生过程的静态稳定性与对象尺寸相关, 所以实验中只有上升阶段而无下降段, 而数值模拟中有下降段。

图 12 为模拟中 PBX-9501 主要裂纹的形成过程, 其中 a、b、c 分别为 y 方向应变为 0.0015、0.0025、0.0027 时的微裂纹的形成及分布。由于 PBX-9501 颗粒的刚度远远大于黏结剂刚度, 在数值模拟中接近刚性体的变形行为。从图 12 可以看出, 界面刚度退化以

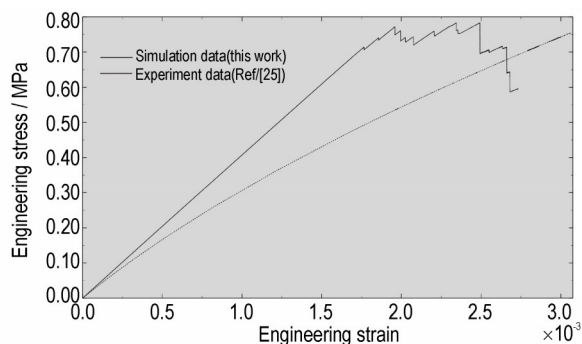
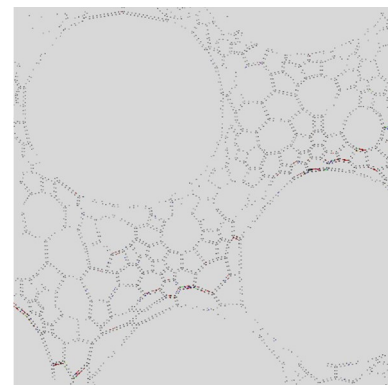
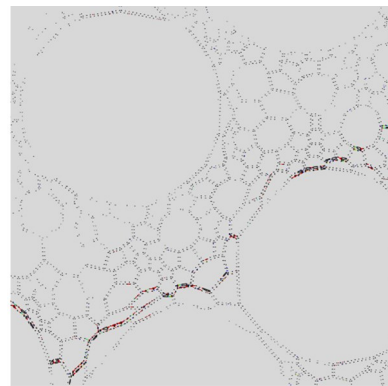


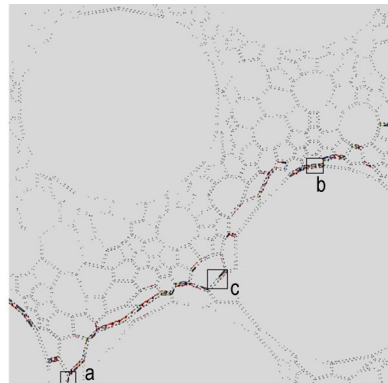
图 11 拉应力应变关系的数值模拟与实验数据^[25]结果对比
Fig.11 Comparison of the stress-strain relationship of simulation with the experimental data^[25]



a. $\varepsilon_y = 0.0015$



b. $\varepsilon_y = 0.0025$



c. $\varepsilon_y = 0.0027$

图 12 拉伸载荷下模型的断裂过程

Fig.12 Fracture process under tension

及微裂纹的产生是由于 PBX-9501 整体变形的协调性与严重的局部刚度不均匀之间的矛盾所引起的。过大的局部刚度需要释放, 整体上主裂纹方向垂直于应变加载方向, 并沿大颗粒边界扩展; 局部裂纹的产生与颗粒间相对位移相关。图 13 为图 12c 中 a、b、c 3 个区域放大图, 模拟中微裂纹产生的结果由图 13 可见, 其中 a 为相邻颗粒的相对错开而产生的微裂纹, b 为相邻颗粒相对张开而产生的微裂纹, c 为相邻颗粒的相对转动而产生的微裂纹。

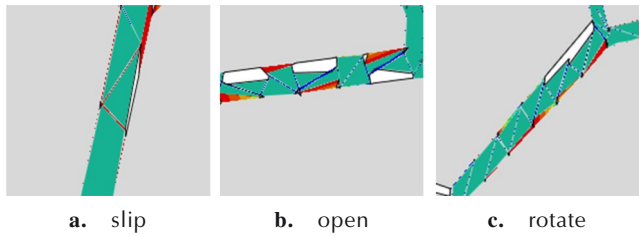


图 13 协调变形中微裂纹产生的 3 种情况
Fig.13 Three cases of microcracks in coordinated deformation

在图 11 中数值模拟与实验结果存在的差异有以下原因。一是数值模拟的模型过于理想化,实际上 PBX 内部包含着大量不规则、跨尺度的孔隙^[26-28],以及 PBX 在制备与存储过程中在各种复杂载荷作用下使得部分界面产生刚度退化甚至产生微裂纹,会使得数值模拟的初始刚度偏高。二是巴西圆盘实验中 PBX-9501 的应变与应力关系是在一定的假设下通过间接测量而得出,表现为当应力达到断裂强度时 PBX-9501 就产生宏观裂纹。三是数值模拟结果与代表体积元的尺寸密切相关,存在尺寸效应。从应变和能量两个角度分析收敛性,如图 14 所示。

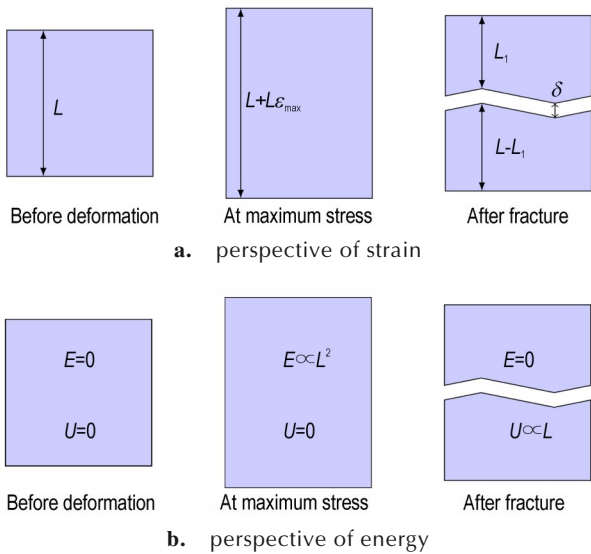


图 14 从两种角度分析收敛性
Fig.14 Analysis of convergence from two perspectives

从应变的角度来看,如图 14a,其中 ϵ_{max} 为最大应力时对应的应变, δ 为界面断裂时的张开位移,在达到最大拉伸强度前,应变几乎均匀产生于代表体积元,而达到最大拉伸强度之后应变的产生主要来源于断裂面之间的位移,代表体积元的尺寸越小则数值模拟的应变与应力关系中的刚度退化阶段就越大。而当代表体

积元的尺寸 L 足够大,则无刚度退化阶段。用数学公式可表达为

$$L\epsilon_{max} \propto L, \delta \propto L^0 \Rightarrow \exists L_0, \forall L > L_0, s.t. L\epsilon_{max} > \delta \quad (5)$$

界面断裂所需位移完全能够由代表体积元应变减小而产生的位移提供,则数值模拟的应变与应力关系中刚度退化阶段将不存在,达到最大应力时主裂纹产生过程不可能静态平衡,是一个失稳的过程,采用静力隐式分析难以收敛。

从能量的角度分析,如图 14b,其中 E 为弹性能, U 为断裂能,代表体积元在最大应力时的弹性能正比于代表体积元尺寸的平方 L^2 ,而断裂面所需能量正比于代表体积元的尺寸 L 。随着 L 的增大,当弹性能大于断裂能时裂纹的扩展不需要外界能量,主裂纹产生是一个失稳的过程。用数学公式可表达为

$$E \propto L^2, U \propto L \Rightarrow \exists L_0, \forall L > L_0, s.t. E > U \quad (6)$$

尽管实际断裂过程中所需的断裂能与断裂面相对位移并非简单的线性关系,但同样可以得出随着代表体积元尺寸的增加进行有限元静力隐式分析时收敛性越差的结论。

5 结论

考虑由到 Voronoi 方法得到的模型的局限性,本研究首先通过随机生成三级配圆,并采用大级配最大化方法,在 Voronoi 方法的基础上进行改进,建立了更加符合实际的不同级配下晶粒分布的二维几何模型。改进后的模型中组分含量可通过黏结剂厚度调节,颗粒分布随机,相对于单纯的 Voronoi 方法得到的模型更加符合实际 PBX 的微观结构。由改进后的模型建立二维代表体积元,采用三阶段黏结界面损伤本构关系,对含有微观结构的 PBX-9501 进行静态拉伸下的界面脱粘进行了数值模拟,研究了静态拉伸下颗粒与黏结剂界面力学行为。结果表明,本研究建立的模型所模拟的应力-应变曲线与实验数据对比存在较小的差异。本研究从 PBX-9501 微观结构、实验与数值模拟 3 个方面分析了产生差异的来源,得出进行有限元隐式静力分析界面脱粘行为时代表体积元的尺寸越大则收敛性越差的结论。

参考文献:

[1] 陈鹏万,丁雁生.高聚物黏结炸药的力学行为及变形破坏机理[J].含能材料,2000,8(4):161-164.
CHEN Peng-wan, DING Yan-shen. Mechanical behaviour and deformation and failure mechanisms of polymer bonded explosives[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2000, 8(4): 161-164.

- iao), 2000, 8(4): 161-164.
- [2] ANNAPRADA S R, SUN D, GARIMELLA S V. Prediction of effective thermo-mechanical properties of particulate composites[J]. *Computational Materials Science*, 2007, 40: 255-266.
- [3] BANERJEE B, CADY C M, ADAMS D O. Micromechanics simulations of glass-epoxy mock polymer bonded explosives[J]. *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2003, 11(4): 457-475.
- [4] PELISSOU C, BACCOU J, MONERIE Y, et al. Determination of the size of the representative volume element for random quasi-brittle composites[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2009, 46: 2842-2855.
- [5] KANIT T, FOREST S, GALLIET I, et al. Determination of the size of the representative volume element for random composites: Statistical and numerical approach[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2003, 40: 3647-36379.
- [6] 戴开达, 刘龔龙, 陈鹏万, 等. PBX炸药有效弹性模量的有限元模拟[J]. 北京理工大学学报, 2012, 32(11): 1154-1158.
DAI Kai-da, LIU Yan-long, CHEN Peng-wan, et al. Finite element simulation of effective elastic modulus of PBX explosives[J]. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2012, 32(11): 1154-1158.
- [7] 贾宪振, 王浩, 王建灵. 炸药有效弹性性能的细观尺度仿真预估[J]. 含能材料, 2013, 21(4): 469-472.
JIA Xian-zhen, WANG Hao, WANG Jian-ling. Mesoscale simulation of effective elastic properties of explosive[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2013, 21(4): 469-472.
- [8] ARORA H, TARLETON E, LI-MAYER J, et al. Modelling the damage and deformation process in a plastic bonded explosive microstructure under tension using the finite element method[J]. *Computational Materials Science*, 2015, 110: 91-101.
- [9] MANNER V W, YEAGER J D, PATTERSON B M, et al. In situ imaging during compression of plastic bonded explosives for damage modeling[J]. *Materials*, 2017, 10(6): 638-651.
- [10] 韦兴文, 李明, 李敬明等. 孔隙对TATB基高聚物黏结炸药有效弹性模量的影响[J]. 含能材料, 2014, 22(4): 493-497.
WEI Xing-wen, LI Ming, LI Jing-ming, et al. Influence of porosity on effective elastic modulus of TATB based polymer bonded explosive[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2014, 22(4): 493-497.
- [11] GUO Hu, LUO Jing-run, SHI Ping-an, et al. Research on the fracture behavior of PBX under static tension[J]. *Defence Technology*, 2014, 10(2): 154-160.
- [12] 王竞成, 罗景润. 基于Voronoi细观数值模型预测PBX的有效弹性模量[J]. 含能材料, 2017, 25(7): 546-551.
WANG Jing-cheng, LUO Jing-run. Predicting the effective elastic modulus of PBX based on Voronoi meso-scale numerical model[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2017, 25(7): 546-551.
- [13] WU Zhijun, XU Xiangyu, LIU Quanshen, et al. A zero-thickness cohesive element-based numerical manifold method for rock mechanical behavior with micro-Voronoi grains[J]. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 2018, 96: 94-108.
- [14] 康歌, 陈鹏万, 曾乙伦, 等. 一种高颗粒体积分数PBX细观模型的生成方法[J]. 含能材料, 2018, 26(9): 772-778.
KANG Ge, CHEN Peng-wan, ZENG Yi-lun, et al. A method of generating mesoscopic models for PBXs with high particle volume fraction[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2018, 26(9): 772-778.
- [15] 范正杰, 刘占芳. 升温 and 降温引起TATB基PBX炸药脱粘的数值分析[J]. 应用数学和力学, 2020, 41(9): 956-973.
FAN Zheng-jie, LIU Zhan-fang. Numerical analysis on debonding of crystal-binder interface in TATB-based polymer-bonded explosive caused by heating and cooling processes[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2020, 41(9): 956-973.
- [16] 张超, 刘占芳. 低压对变温环境下高聚物黏结炸药界面损伤的抑制[J]. 应用数学和力学, 2020, 41(10): 1057-1071.
ZHANG Chao, LIU Zhan-fang. Inhibition of low pressure on interfacial damage in polymer bonded explosive under temperature fluctuation[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2020, 41(10): 1057-1071.
- [17] KANG Ge, Ning You-jun, CHEN Peng-wan, et al. Meso-structure construction and effective modulus simulation of PBXs[J]. *Journal of Energetic Materials*, 2020, 38(3): 261-282.
- [18] 周培德. 计算几何[M]. 北京: 清华大学出版社, 2008: 88-91.
ZHOU Pei-de. Computing geometry[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2008: 88-91.
- [19] RAE P J, GOLDREIN H T, PALMER S J P, et al. Quasi-static studies of the deformation and failure of β -HMX based polymer bonded explosives[J]. *Proc R Soc Lond A*, 2002, 458(2019): 743-62.
- [20] 颜熹琳, 唐明峰, 甘海啸, 等. 拉剪复合试验测试炸药晶体/黏结剂界面力学特性[J]. 含能材料, 2016, 24(6): 587-591.
YAN Xi-lin, TANG Ming-feng, GAN Hai-xiao, et al. Mechanical properties of explosive crystal/binder interface based on tension-shear test[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(6): 587-591.
- [21] WU Y L, LING Z, DONG Z F. Stress-strain fields and the effectiveness shear properties for three-phase composites with imperfect interface[J]. *Int J Solids Struct*, 2000, 37(9): 1275-1292.
- [22] ZHONG Z, MEGUID S A. On the elastic field of a spherical inhomogeneity with an imperfectly bonded interface[J]. *J Elast*, 1997, 6(2): 91-113.
- [23] TAN H, LIU C, HUANG Y, et al. The cohesive law for the particle/matrix interfaces in high explosives[J]. *J Mech Phys Solids*, 2005, 53(8): 1892-1917.
- [24] TAN H, HUGNG Y, LIU C, et al. The Mori-Tanaka method for composite materials with nonlinear interface debonding[J]. *Int J Plast*, 2005, 21(10): 1890-1918.
- [25] PALMER S J P, FIELD J E, HUNTLEY M. Deformation, strengths and strains to failure of polymer bonded explosives[J]. *Proc R Soc Lond A*, 1993, 440(1909): 399-419.
- [26] WILLEY T M, OVERTURF G. Towards next generation TATB-based explosives by understanding voids and microstructure from 10nm to 1cm[C]//40th International Annual Conference of ICT, Karlsruhe: ICT, 2009.
- [27] WILLEY T M, BUUREN T, LEE R I, et al. Changes in pore size distribution upon thermal cycling of TATB-based explosives measured by ultra-small angle X-ray scattering[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2006, 31(6): 466-471.
- [28] CHEN Xin-fa, LIU Jie-jian, HUANG Xi-cheng, et al. Numerical modeling of crack growth in polymer-bonded explosive with cavity subject to compression[J]. *Advances in Mechanical Engineering*, 2009, 11(6): 168781401985695.

Numerical Simulation of PBX-9501 Crack Generation Under Tensile Loading

HE Ge-yi¹, LIU Zhan-fang^{1,2}, DUAN Lian-long¹

(1. College of Aerospace Engineering, Chongqing University, Chongqing University, Chongqing 400044, China;

2. Chongqing Key Laboratory of Heterogeneous Material Mechanics, Chongqing 400044, China)

Abstract: Polymer Bonded Explosive (PBX) is a multiphase composite material composed of pure explosive particles occupying a high volume fraction and a little polymer binder. The interface debonding between particles and binder and the mesostructure play a critical role in the mechanical properties of the material. In this paper, according to the stochastic simulation method combined with the Voronoi method, the representative volume element model of PBXs is established at the mesoscale. When the particles generated by Voronoi method are multi-graded, the particles around the large ones show a strip-scattering shape. The method of mesostructure modeling of PBXs was improved based on Voronoi method. Considering the mesoscopic interface characteristics of PBX-9501, the interface damage evolution between particle and binder under static tension was numerically simulated by using the constitutive relationship of three-stage bonding interface. The results show that the macroscopic mechanical properties of PBX-9501 agree well with the experimental data. The relationship between convergence and the size of representative volume element is discussed. It is concluded that the larger the size of the representative volume element is, the worse the convergence of the interface debonding simulation is.

Key words: polymer bonded explosive (PBX); stochastic model; delaunay triangle; interface debonding

CLC number: TJ55; O34

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2021333

(责编: 王艳秀)