

文章编号: 1006-9941(2024)05-0554-16

复合固体推进剂界面多尺度数值模拟研究进展

余天昊, 闫亚宾, 王晓媛

(华东理工大学机械与动力工程学院, 上海 200237)

摘要: 固体推进剂界面作为固体发动机结构中力学性质相对薄弱的部分之一, 明确其物化性质、损伤演化模式以及脱湿对推进剂结构完整性的影响是极其重要的研究内容。与实验相比, 利用数值模拟能够快速、高效地研究各种界面体系下的不同物化性质, 具有较好的应用前景。从微观尺度分子动力学、细观尺度有限元数值仿真与宏观数值模拟角度出发, 综述了复合固体推进剂多种界面力学性质的研究进展, 探讨了多尺度下复合固体推进剂界面数值模拟对固体推进剂工程设计的推动作用与目前存在的不足, 并展望了未来的发展方向。

关键词: 固体推进剂; 界面; 多尺度; 数值模拟

中图分类号: TJ55; V512

文献标志码: A

DOI: 10.11943/CJEM2023239

0 引言

在航天领域, 固体推进剂一直是推动航天器、导弹和火箭的主要动力源之一。与液体推进剂相比, 固体推进剂具有许多独特的优势, 如较高的能量密度、简化的发射系统和更低的维护成本等, 因此受到了普遍的关注和广泛的应用^[1-4]。固体推进剂是内部存在各种复杂相态的典型颗粒增强粘弹性材料, 其细观结构主要包括端羟基聚丁二烯、聚醚黏合剂等基体, 高氯酸铵、铝粉与黑索今/奥托克今等固体颗粒填料以及基体-颗粒界面, 同时, 固体推进剂与发动机壳体之间也存在推进剂-衬层界面。为了更好地理解和优化复合固体推进剂的性能, 研究人员需要深入研究其内部界面的力学性质、物化特性与损伤演化形式, 尤其是界面脱粘(即颗粒“脱湿”)现象。在储运、发射与飞行等阶

段, 固体推进剂会承受不同条件下的复杂载荷, 这对界面的剪切、拉伸等力学性能提出了要求; 而界面的结合能、扩散系数与触发键长度等物化特性则不仅直接决定了推进剂界面的力学性能, 也对推进剂整体的稳定性与燃烧效率有重要的影响; 另外, 固体推进剂界面的损伤, 尤其是由于颗粒-基体界面的拉伸、剪切与疲劳作用导致界面处产生微小孔洞逐渐成核聚集而造成的脱湿现象, 是破坏固体推进剂整体力学性能的重要因素, 也是近年来对固体推进剂细观层面数值模拟的重点。作为复合固体推进剂结构中最薄弱也是最有必要研究的部分^[5-7], 通过研究体系界面, 对复合固体推进剂界面的力学性质、物化特性、损伤演化模式特别是及颗粒脱湿对整体材料的影响进行深入的研究和分析, 可以实现推进剂配方的优化, 进而实现对固体推进剂材料的性能评估预测, 并延长固体推进剂贮存寿命。

由于复合固体推进剂中包含易燃易爆的填充颗粒, 进行服役阶段的实验研究一直存在潜在危险, 而进行类似实验研究也需要满足严格的实验室设备和资质要求; 此外, 现有的实验手段也难以测量研究界面力学性质, 例如界面黏结力等部分关键参数。因此, 更高效、便捷的数值模拟方法受到了研究人员的广泛关注。目前人们利用多个尺度的模拟方法对固体推进剂的界面性质进行了数值模拟研究^[8-12], 微观尺度的分子动力学模拟能够从原子、分子排列与金属键/化学键

收稿日期: 2023-11-14; 修回日期: 2023-12-12

网络出版日期: 2024-02-07

基金项目: 国家自然科学基金(52275149)

作者简介: 余天昊(1999-), 男, 硕士研究生, 主要从事高分子与复合材料力学性能多尺度模拟研究。e-mail: thyuu816@163.com

通信联系人: 闫亚宾(1984-), 男, 特聘教授, 主要从事材料性能的微观实验测试与多尺度模拟分析研究。e-mail: yanyabin@ecust.edu.cn

王晓媛(1984-), 女, 副教授, 主要从事高分子与复合材料力学性能模拟及实验测试研究。e-mail: wangxiaoyuan@ecust.edu.cn

引用本文: 余天昊, 闫亚宾, 王晓媛. 复合固体推进剂界面多尺度数值模拟研究进展[J]. 含能材料, 2024, 32(5):554-569.

YU Tian-hao, YAN Ya-bin, WANG Xiao-yuan. Advancements in Multiscale Numerical Simulation of Composite Solid Propellant Interfaces[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2024, 32(5):554-569.

数量与分布等角度来定量解释界面的成键性能与损伤,细观尺度的有限元模拟可以清晰地观察到颗粒和黏结剂基体的形态、各组分的相对位置和体积比以及脱湿过程,而宏观的模拟方法则通过建立含有界面相的宏观力学模型,推导出考虑界面脱粘损伤的唯象力学本构模型。然而,单一的模拟方法往往无法系统深入描述固体推进剂界面的失效、破坏与脱湿等行为,因而需要综合考虑其复杂性、研究目的、计算资源和模拟方法的精度与计算效率,结合多种模拟方法,对界面模型进行跨尺度的模拟并通过实验验证,以更全面地揭示复合固体推进剂的界面性质,缩短研究周期,并为推进剂的配方设计优化提供理论指导。

近年来,国内外对固体推进剂的界面作用进行了深入的研究并取得了诸多成果,孟胜皓^[13]、李悦^[14]与Zou^[15]等系统总结了近年来对固体推进剂界面的实验表征、力学性能测试方法、界面黏结机理与颗粒-基体界面的脱湿等方面的研究,并基于当前的研究进展与成果提出了诸多有价值的见解与展望。然而近年虽然涌现出很多有关于固体推进剂界面在不同尺度下进行模拟的文章,该方向得到长足发展的同时却也暴露出诸如模型体系不完善、参数条件不合理等问题^[1],因此,本综述将概述复合固体推进剂界面在多尺度模拟下的原理、应用与新的研究进展,同时,也将对固体推进剂工程设计的推动作用与目前存在的不足作出阐述,并展望未来可能的发展方向。

1 微尺度模拟进展

微观尺度是指研究范围小于微米(10^{-6} m)的尺度,在该尺度下,可以通过扫描隧道显微镜、透射电镜等方式直观地观测到界面处的微观形貌特征,因此微观尺度的模拟主要通过研究键合界面分子、原子和化学键的类型、键能和排列来分析界面的物化性质。目前,对于复合固体推进剂界面的微观模拟主要采用分子动力学方法。分子动力学(Molecular Dynamics, MD)方法是将力场与经典力学相结合而发展起来的一种模拟计算方法,通过模拟系统中微观粒子的运动,通过数值积分求解其运动方程,得到系统中各个粒子的运动状态,从而得到系统温度、压力、能量等宏观特性,还可以从分子尺度上直接计算推进剂的界面结合能等特性。有关于对固体推进剂界面的分子动力学模拟研究最早可追溯至1997年,Kendrick等^[16]提出了基于分子力学(Molecular Mechanics, MM)和MD的

HMX与PN相互作用力场,为后来固体推进剂界面的MD研究提供了理论基础与方法上的指导。在填料颗粒组分、配方相似的情况下,不同种类的复合固体推进剂仍存在力学、燃烧等性能上的差异,而造成这种差异的本质主要源于推进剂基体与基体-颗粒界面层物化性质的不同,因而本节将分别阐述不同种类复合固体推进剂在微观分子动力学模拟中所表现出的界面性质与存在的区别。除了研究最为重要的颗粒-基体界面层性质,理解颗粒-颗粒共混、共晶界面的化学性质则有助于预测和评估氧化剂颗粒对炸药颗粒热分解的作用,并改善推进剂的燃烧过程;另外,对于将推进剂与壳体可靠而紧密地黏结的衬层,其与固体推进剂界面黏结性能的研究也是发动机结构完整可靠性的重要保障^[17]。

1.1 HTPB推进剂界面

端羟基聚丁二烯(Hydroxy-Terminated Polybutadiene, HTPB)是一种被广泛使用的黏合剂基体,目前对于该黏合剂已经有较为成熟且简单、安全的研制工艺,在低黏度的同时具有较高的能量与优良的力学性能,因而大量的学者对该黏结剂与对应的界面体系进行了研究。兰艳花等^[18]与付一政等^[19]先后对HTPB与不同温度下各晶面的Al和 Al_2O_3 体系进行了模拟,而焦东明等^[20]则研究了键合剂对丁羟推进剂中HTPB与Al/ Al_2O_3 之间界面的吸附能与力学性能,得到了该体系下的结合性能较好的温度条件、晶面与适宜选用的键合剂。Ma等^[21]研究了聚叠氮缩水甘油醚(Glycidyl Azide Polymer, GAP)/HTPB聚合物混合物在癸二酸二辛酯(Dioctyl Sebacate, DOS)和DOS与双(2,2-二硝基丙基)甲醛/乙缩醛(A3)混合物中的相行为,以及A3/DOS增塑GAP/HTPB推进剂浆料的流变性,最终得到了以A3/DOS为增塑剂的完整的GAP/HTPB基推进剂。董戈等^[22]研究了不同应变速率下AP/HTPB界面的力学性能,结果表明,界面强度随应变速率的增大而增大,与推进剂宏观力学性能的变化趋势一致。Wang等^[23]研究了一种具有HTPB的 ϵ -CL-20/HMX共晶聚合物,得到了该体系下的结合能、对相关函数和力学性能,发现共晶/HTPB PBX的刚度较弱,而其延展性优于共晶。温彦威等^[24]研究了IPDI型HTPB推进剂与玻璃钢(FRP)绝热层界面黏接性能及增强技术,发现在黏接层界面处增加含有异氰酸根活性基团的胶黏剂BN-01能够显著增强界面推进剂的力学性能强度,并有效改善界面黏接性能。以上研究涵盖了HTPB推进剂黏合剂基体与多种组分间界面的物化性质,对于了解HTPB推进剂的界面作用

机理、指导 HTPB 推进剂配方具有一定的意义。根据文献[22],图1展示了 AP/HTPB 界面的 Materials Studio 软件建模,正确合理地在软件中建立界面层体系模型是计算界面层物化性质的基础与关键。

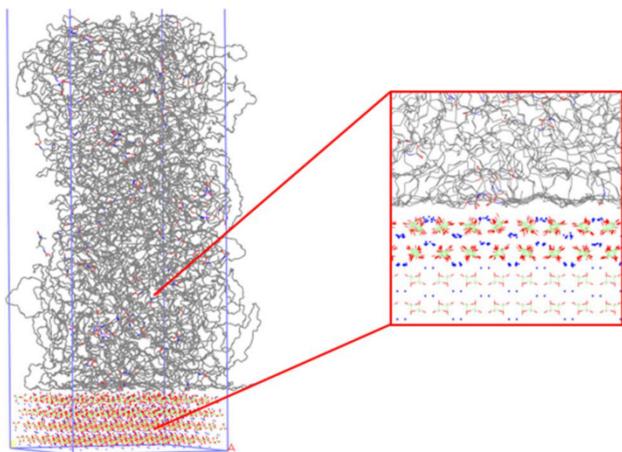


图1 基体-颗粒界面体系的分子动力学软件建模^[22]

Fig.1 Molecular dynamics modeling of matrix-particle interface system^[22]

1.2 NEPE 推进剂界面

除 HTPB 推进剂外,硝酸酯增塑的聚醚聚氨酯(Nitrate Ester Plasticized Polyether, NEPE)推进剂也具备优良的力学性能、较大的密度以及高比冲等优点,同样是具有发展潜力的一类固体推进剂。Zhang 等^[25-26]先后研究了中性高分子键合剂(Neutral Polymeric Bonding Agen, NPBA)在 NEPE 推进剂中的吸附行为及其机理,以及 NPBA 对 NEPE 推进剂界面相互作用和力学性能的影响,对 NPBA 的分子结构和 NEPE 的配方设计有一定的指导意义。虞振飞^[27]进行了 3 种 NPBA 在各种混合含能增塑剂/黏合剂预聚物中相分离的模拟计算,发现提高 NPBA 的相对分子质量、增大 NPBA 的用量均可加剧 NPBA 在含能增塑剂/预聚物中的相分离程度。Lei 等^[28]设计了三唑固化含能体系的含炔基共聚物,并模拟了其与其与 ϵ -CL-20 的相互作用行为。与不含炔基的 NPBA 聚氨酯固化体系相比,在聚合物链中加入炔基,可直接提高界面强度 12.43%。朱伟等^[29-30]使用扩展 MPCFF 力场对设计的 3 种简化 NEPE/衬层模型进行了 MD 模拟,观察到界面由于交叉固化反应形成的氨基甲酸酯键,并发现成键后界面的刚性与强度均得到了提升;展示了组分分子的浓度分布与迁移情况,观察到 HMX 与 NPBA 分子均呈现向界面层迁移的趋势,AP 分子则保持平均分布。庞爱民等^[31]对 NEPE 推进剂/衬层界面的 MD 研究做出了综合

评述,并通过反应分子动力学明确了影响界面黏接的主副反应与维持界面良好黏结性能的关键。以上研究系统地对于 NEPE 基推进剂包括界面结合能、界面物化性质作出了定量的分析与研究,相比于 HTPB 推进剂,NEPE 推进剂界面的组分更丰富、物化反应过程更复杂,对于键合剂的研究也显得尤为重要,因此上述的研究也从分子角度说明了键合剂的加入使推进剂界面力学性能显著增强的原因,对键合剂的选用具有高度的指导意义。

1.3 其他推进剂界面

此外,对于其他以聚醚、叠氮或系列含氟聚合物为基体的推进剂体系的研究也得到了广泛关注。肖继军等^[32-37]自 2004 年开始对系列含氟聚合物基推进剂颗粒共晶、共混界面体系进行了大量的分子动力学模拟研究,得到了界面层的诸多基本参数,如体系力学性能、结合能与径向分布函数等。Wang M 等^[38]研究了 RDX 与铝界面以及氧化层对热分解的影响。通过三氟甲基或氨基功能悬垂剂对含氟聚合物键合基质的键合增强,可以有效抑制高能含氟聚合物/硝酸复合界面颗粒的脱湿现象。朱伟等^[39]研究了 AP/HMX 复合材料在不同温度下的特性,得到了 HMX 在 AP/HMX 复合材料中的结合能、热膨胀系数和触发键长度。Wang N 等^[40]探究了 RDX 与不同氧化层的 Al 之间的界面物化性质,发现预测的 RDX 在 Al(111) 表面的吸附能、RDX 和 RDX/Al 的表观活化能与从头算的结果一致。Lan 等^[41]研究了温度和 BDNPA/BDNPF(A3) 含量对六硝基己氮杂异伍兹烷(Hexanitrohexaazaisowurtzitane, HNIW)与醋酸丁酸纤维素(Cellulose Acetate Butyrate, CAB)/A3 的力学性能和结合能的影响,结果表明,A3 的加入量比温度对力学性能的影响更大。Zhang 等^[42]研究了 CL-20/DNB 材料的界面相互作用、机械性质和扩散系数,并利用计算确定的界面分子扩散系数,分析了 CL-20 和 DNB 分子在界面层中的扩散能力。李苗苗等^[43]研究了 RDX 与 3,3'-双-(叠氮甲基)-氧杂环丁烷(BAMO)的界面层相互作用。结果表明,BAMO 与 RDX(010)面之间分子相互作用最强,其次是(100)和(001)面,并以对相关函数描述了 RDX 和 BAMO 之间的相互作用。Hang 等^[44]建立了一种由不同摩尔比的 CL-20 和 NTO 组成的新型高能共晶化合物,并对其性能进行了预测,发现其具有良好的性能,可以看作是一种新型的含能化合物。Song 等^[45]研究了二羟铵 5,5'-双四唑-1,1'-二酸酯(TKX-50)和 TKX-50 基高能混合材料(HE)与含氟聚合物体系的结

合能、径向分布函数、力学性能等。结果表明,在TKX-50(100)表面添加含氟聚合物形成的TKX-50 HE聚合物具有优异的热力学稳定性。张丽娜^[46]计算了GAP与PDMH的反应产物(GAP_PDMH)分别与RDX,HMX,AP构成的模型体系的相互作用能和径向分布函数,证实了某些原子之间存在着较强的氢键作用,而另一些原子之间有较强的范德华作用。崔瑞禧等^[9,47]计算了多类硼酸酯键合剂与RDX晶面的结合能,发现由于硼酸酯键合剂与RDX不同晶面的结合模式不同导致其界面的结合能不同,兰艳花等^[48]对二甲基海因对GAP/RDX推进剂、N100交联环氧乙烷-四氢呋喃共聚醚键合剂等多种体系进行了结合能与力学性能的模拟,得到了该体系下的结合性能较好的温度条件、晶面与键合剂的选用。Meng等^[49]研究了不同添加剂对DNAN/HMX熔铸材料的机械性能的影响,发现界面结合能与DNAN/HMX熔铸材料的抗拉强度、断裂方式存在相关性,结合能越大,HMX颗粒与DNAN基体的黏结性越好,装药的抗拉强度越高,晶粒的断裂方式由穿晶/沿晶混合断裂转变为纯穿晶断裂。王晓倩等^[50]研究了双(2,2-二硝基丙基)缩甲醛/缩乙醛(BDNPF/A)增塑的端羟基四氢呋喃-环氧乙烷共聚醚(PET)推进剂/衬层黏接体系中关键组分在界面层的迁移规律及其对黏接性能的影响,发现2种不同类型的增塑剂对固化温度的敏感程度不同,且提高固化剂的用量有助于衬层界面层的扩展。纵观目前对于推进剂-衬层界面的模拟研究,研究人员主要的关注点在于通过观察微观界面的分子迁移演化得到推进剂关键组分在界面处的浓度分布与迁移规律,这对实际工程应用中固体发动机黏结层界面胶黏剂、固化剂的选用与配比具有一定的指导作用。上述文献不仅研究了各类固体推进剂界面的结合能、径向分布函数、力学性能等界面性质,也从分子、化学键与晶粒破坏机制等角度解释了由于体系不同而造成界面物化性质不同的原因,加深了人们对固体推进剂界面体系的综合认知,为固体推进剂基体与填料的选用与搭配提供了理论依据与理论指导。

2 细观尺度模拟研究进展

细观尺度是指研究范围处于微米(10^{-6} m)与毫米(10^{-3} m)之间的尺度。在该尺度下,需要关注的是颗粒和黏结剂基体的形态、各组分的相对位置和体积比等信息。在细观尺度的模拟下,基体-颗粒界面建模主

要分为颗粒填充细观模型构建与界面模型构建。与微观尺度不同的是,细观尺度更关注的是微观尺度难以观察到的颗粒“脱湿”现象,模型构建的精度将直接决定数值模拟的精度,因此如何构建更接近于实际条件的模型是该尺度下模拟的重点。利用有限元模型进行细观尺度模拟的方法是一种宏-微观耦合的建模方法,可以有效地描述复合固体推进剂内部界面的行为,这种方法在分析复合固体推进剂的界面断裂和损伤行为方面应用广泛,有助于改进推进剂的性能。

2.1 含颗粒-基体界面的颗粒填充细观模型构建

为了研究载荷作用下由于颗粒的存在而产生应力重新分布及应力集中诱致微裂纹损伤,特别是颗粒的“脱湿”损伤,早在2002年,彭威等^[51-52]便建立了一个无限大并具有周期变化的线性粘弹体模型,用轴对称粘弹性有限元模型计算了复合固体推进剂颗粒界面处和基体内的应力分布,然而,这样的模型无论是从建模还是结果,都与实际存在较大的差距,随着计算机技术的发展,为了生成更接近于实际工况且具有代表性的颗粒填充模型结构,目前主流的方法大多使用代表性体积元(Representative Volume Element, RVE)建立固体推进剂的基体-颗粒模型。封涛、伍鹏、韩龙与王广等^[2,11-12,53-55]采用了较为主流的分子动力学颗粒填充算法建立复合固体推进剂基体-颗粒的细观结构模型,用于表征单轴拉伸加载下经历的损伤演化过程。主流的颗粒填充算法能够用于大部分颗粒-基体模型的工况条件,然而精确性却有所欠缺,并且在计算具有大量复杂或不规则填充颗粒的三维模型时效率较低,因此董戈等^[56]与Shen等^[57]分别通过遗传算法、基于时域自适应算法的Voronoi单元法对颗粒填料进行填充,得到的模型显著提高了仿真结果的精度;张志成,Wang等^[58]则通过对实验图像进行处理的方法直接获取更真实且具有可信说服力的数值仿真模型;武鑫^[59]则通过数值流形方法(Numerical Manifold Method, NMM)而非代表性体积元法对高聚物黏结炸药PBX进行细观力学建模,简化了建模过程并提高了效率。整体而言,构建颗粒填充的细观模型目前普遍以代表性体积元法为基础,根据填充颗粒的比例、形状与复杂程度采用不同的颗粒填充算法以获得更准确并接近实际的模型。一些研究者也会通过处理拍摄得到的固体推进剂细观结构图像来获得用于细观尺度模拟的模型,或将其与代表性体积元法结合,来提高构建模型的可信度。根据文献[12],复合固体推进剂细观颗粒-基体二维模型及目前普遍认可与使用的有限元

边界条件与网格设置如图2所示。

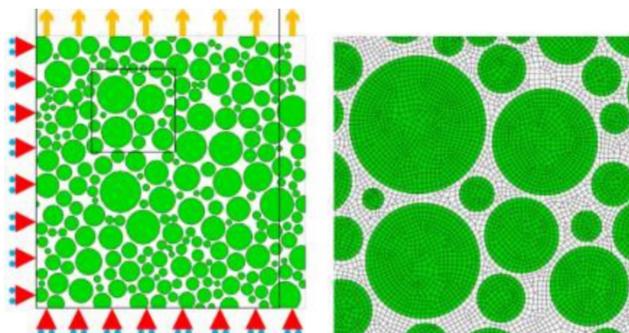


图2 推进剂颗粒-基体模型及其有限元边界条件与网格设置^[12]

Fig.2 Propellant particle-substrate model and its finite element boundary conditions and mesh settings^[12]

在建立合理的颗粒填充模型结构后,还需要使所建立的模型能够准确模拟出材料体系在失效、断裂时的动态过程并通过该过程分析数值。为此,目前的研究人员普遍使用由Barenblatt^[60]和Dugdale^[61]提出的内聚力模型(Cohesive Zone Model, CZM)来模拟固体推进剂基体-颗粒处的界面力学本构响应。CZM是一种基于牵引分离定律作为本构来定义界面力与界面位移之间关系的模型,常用的内聚力模型有双线性内聚力模型,指数型内聚力模型,多项式型内聚力模型等^[62],由于双线性内聚力模型具有形式简单,易于实现等优点,前文所提到的封涛、武鹏、张志成等^[12, 53-54, 63]均使用了该模型研究各自体系的界面失效情况。然而,相较于其他的内聚力模型,双线性内聚力模型不仅在界面单元失效过程中存在难以收敛的问题,也有研究证明其更多适用于材料脆性断裂的过程^[64];指数型内聚力模型最早由Xu与Needleman^[65]提出,是一种法向、切向耦合的内聚力模型,其断裂能方程是一个连续的函数,后来经众多学者推广、改进与完善,目前已成为较为成熟且认可度高的内聚力模型。由于指数型内聚力模型函数的连续性,使用该模型时收敛性明显优于双线性内聚单元,然而目前主流有限元软件例如ABAQUS中并没有内置指数型内聚单元,研究者需自行编写UMAT子程序将所需的指数型内聚单元参数嵌入有限元软件中。另外,由于一些固体推进剂体系在加载过程中,应力-应变曲线呈现出的材料损伤特性不符合双线性或指数型内聚单元的损伤形式,或是黏合剂呈现对应变率较为敏感的粘弹特性,此时则需要建立相应的改进型内聚力模型来阐明界面间的本构关系。Han等^[66]提出了一个速率相关

的CZM,以分析HTPB推进剂的裂纹扩展过程中的速率效应,使模拟得到的载荷位移曲线与实验数据吻合较好,Cui等^[67]通过使用多个Maxwell盒子并联来增强模型的适应性,开发了考虑了时间和温度对材料性质的粘弹性CZM,实现了模型的实验验证,丁伍等^[68-69]为了研究推进剂/衬层界面I型破坏的温度相关特性,提出损伤变量 D 作为一个因子代入到双线性内聚模型中,新模型的结果准确预测了温度影响的界面载荷-位移特性。随后,研究了固体火箭发动机界面的混合模式剥离过程,引入了Park-Paulino-Roesler(PPR)模型并开发了用户子程序,以更好地模拟界面行为。Li等^[70]基于样品组成和形貌对代表性体积元模型应用周期边界条件,编制了具有初始损伤的超弹性基体损伤和双线性/指数颗粒-基体界面内聚模型。Lei等^[71]建立了一个具有明确的物理意义的连续统理论来模拟固体推进剂的脱湿和力学响应,引入了归一化裂纹长度参数来描述界面分离,并建立了考虑了界面强度、空隙的体积松弛和聚合物黏结剂的粘弹性的本构模型,相较于CZM模型,使用该方法的优点在于可在冲击载荷下预测固体推进剂在结构层面的热-力学响应,评估固体火箭发动机在役状态。根据文献^[62],双线性与指数型内聚力模型如图3所示,展示了2种基本内聚力模型在切向、法向的本构响应方式。

目前研究人员大多使用二维平面模型模拟复合固体推进剂细观界面的力学响应,然而复合固体推进剂在实际情况下是1个药柱在3个方向均有一定的厚度,因此二维模型并不能很好地描述实际的情况。在三维颗粒-基体RVE模型的细观界面模拟方面,Mantous等^[72-73]采用基于微扰Petrov-Galerkin方法的三维拉格朗日有限元模型,采用考虑模态混合的内聚规律来模拟颗粒-基体界面的损伤成核和演化过程,所提出的有限元模型能够预测非均匀细观场的损伤沿颗粒-基体界面的形核和扩展。Francqueville等^[74-75]则结合了分子动力学算法与解析状态方程算法,并开发了一种新的生成方式,以获得不规则多面体随机分散的周期细胞,研究了填料形状对高填充复合材料(>50%)有限应变行为的影响。该方法可靠地减少了计算三维模型的工作量,并与实验数据良好地吻合。由于三维细观模型界面的复杂性,模型的求解过程中计算量较二维条件要大得多,且易产生不收敛的情况,是一个需要长期探索并克服的问题。

2.2 内聚力模型参数获取

要利用内聚力模型模拟仿真细观尺度下的颗

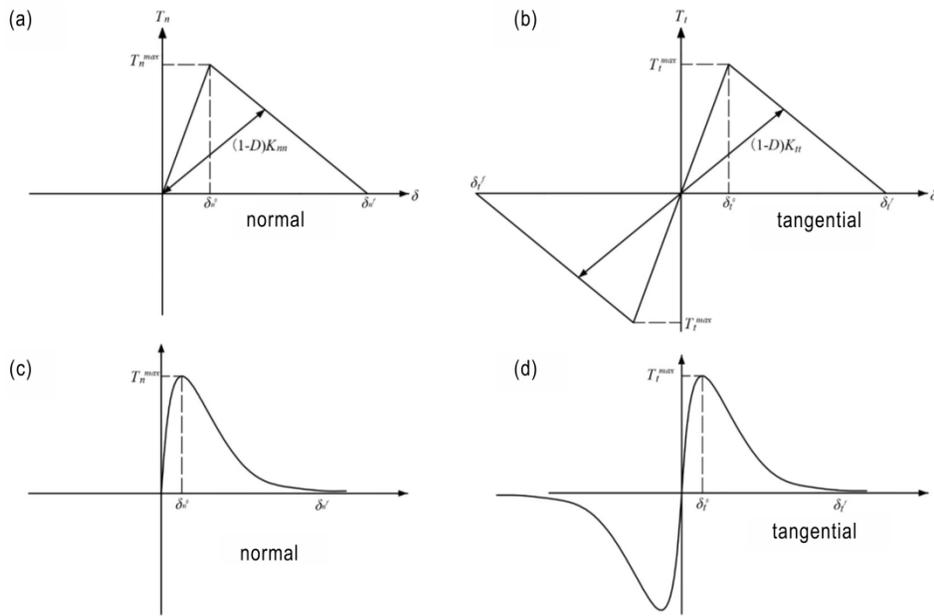


图3 双线性与指数型内聚力模型^[62]
 Fig.3 Bilinear and exponential cohesive model^[62]

粒-基体模型,其核心与难点是需要确定界面模型参数的取值。目前,研究人员大多采用参数反演法来获得界面模型的参数,即通过不断调整内聚模型的参数来反向拟合实验得到的结果,最终得到准确的界面本构模型。反演算法以 Hooke-Jeeves 算法为基础,Gu^[76]与 Cui^[77]等便通过 Hooke-Jeeves 优化算法对内聚力模型参数进行反演分析,得到了优化后的界面参数数值,并通过反演后的参数计算了推进剂的理论断裂强度,并与实验结果进行了比较。其结果虽与实验结果相对接近,但由于并未考虑初始损伤,与实际仍存在较为明显的差距,需要进行特定的优化,因此,封涛等^[12]针对不同粒径的颗粒/基体界面的力学性能不同的特点,提出了一种考虑颗粒-基体界面力学性能随颗粒粒径变化的分步优化反演的方法,该方法相较传统方法具有更高的精确度,更适合用于对复合固体推进剂脱湿过程的研究;Li等^[70]从细观角度模拟了推进剂损伤断裂的全过程,通过结合多种算法的优势,利用改进的粒子群优化算法与 Hooke-Jeeves 优化算法共同对多参数进行了反演,显著提高了参数的精确程度;计算了推进剂的断裂强度,并发现颗粒脱湿后不再承受载荷,颗粒之间的基体出现高应力区,RVE 整体刚度降低,力学性能减弱;随着局部基体的拉伸断裂,颗粒除湿引起的孔隙的不断叠加将导致裂纹的萌生和扩展,整体应力由缓慢增长转变为快速下降。因此,推进剂力学性能的弱化从颗粒脱湿开始,加速基体损伤,两者具有共生作

用。在针对不同的具体工况方面,Toulemonde 等^[78]研究了高填充率弹性体的非线性行为和断裂,考察了填料的体积分数、大小和性质以及基体刚度对其的影响。Li 等^[79]研究了推进剂的微观力学性能和初始界面缺陷对宏观力学性能的影响。结果表明,颗粒填充体积分数主要影响推进剂初始模量,体积分数越大,初始模量越大。根据文献[12],HTPB 推进剂单轴拉伸条件下颗粒-基体界面应力分布与断裂形式如图 4 所示,当应变较小时,固体推进剂中的应力分布不均匀,这是由于颗粒-基体界面之间的变形不一致造成的,作为弹性体,颗粒的模量比基体大得多,因此基体的变形比颗粒大得多,这使得颗粒/基体界面处成为失效的起点;当应变逐渐增大后,大颗粒区域附近的局部应变非常大,导致应力集中非常明显,较大颗粒/基体界面的应力首先达到内聚破坏强度,从而导致界面开始脱粘;当应变达到 50% 后,越来越多的界面发生脱粘,微观孔洞发育、聚集,宏观断裂形成,最终导致复合固体推进剂断裂。

内聚力模型的关键参数通常通过参数反演法得到,然而反演法本质上仍是一种经验论的试错法,通过实验数据间接地得到无限接近于实际的本构模型参数,同时因为参数反演只能针对特定的、具体的仿真实验,因而缺乏普适性。并且目前使用的内聚力模型大都基于非真实的界面力学性能状态,黏结力与界面位移之间的真实关系有待进一步阐明。然而,目前对于

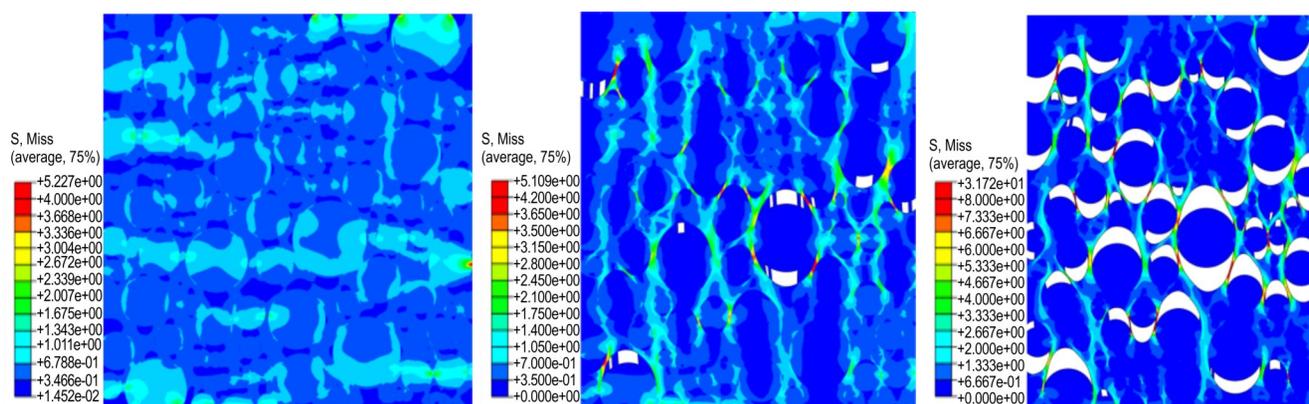


图4 单轴拉伸条件下HTPB固体推进剂颗粒-基体界面应力分布与断裂形式^[12]

Fig.4 Stress distribution and fracture forms at the particle-matrix interface of HTPB propellants under uniaxial tensile conditions^[12]

能够直接测量内聚力和位移的设备报道较少,尚未形成公认的理论体系。因此,能否通过实验或数值模拟又或者理论推导的方式来得到临界脱湿位移并给出内聚力模型参数具体的物理表达式,是目前需要研究的重点。

3 宏观尺度数值模拟进展

宏观尺度是指研究范围大于毫米量级(10^{-3} m)的尺度,在该尺度下,由于很难直接观测到固体推进剂中的颗粒分布与界面形貌,因此大多通过提取力学性能实验得到的特征曲线参数来间接表征推进剂界面处的颗粒脱湿损伤,并通过建立宏观的基体相-过渡相-颗粒相力学模型研究过渡相(即界面相)对推进剂力学性能产生的影响,最终建立考虑界面脱粘的复合固体推进剂本构模型。

3.1 固体推进剂三相模型

在对固体推进剂研究的早期,由于实验设备与技术的限制,研究人员对固体推进剂细观组分的具体形貌与性质认知有限,因此为了定性表征键合剂对固体推进剂黏合剂相与填料颗粒相的作用效果,庞爱民^[80]在吸收键合作用模型的优点、结合网格与形态结构理论的基础上,提出了固体推进剂过渡相的力学模型,建立了推进剂结构因素与力学性能表征参数的定性关系,提出了过渡相模量与基体模量匹配的调节方法。这种方法经推广后,田德余等^[81]提出了考虑键合剂作为界面相的丁羟固体推进剂三相模型,建立了推进剂整体力学性能与基体、颗粒力学性质及界面相的数学关系,计算得到的结果与实验吻合良好,并预测了多级配比的固体推进剂配方;贵大勇等^[82]则将考虑界面相的NEPE高能推进剂三相模型与粘弹模型相结合,同样地

建立了推进剂整体力学性能与基体、颗粒力学性质及界面相的定性关系,得到的结果与实验测试结果的误差小于20%;张鑫^[83]则建立了GAP/CL-20高能固体推进剂基体相-过渡相-颗粒相的物理与数学模型,并从分子层面解释了影响该固体推进剂力学性能的原因,通过提出的力学模型对固体推进剂的力学性质进行了有效的调节。早期的宏观三相模型在一定程度上定性解释了键合剂作为界面连续相对固体推进剂整体力学性能的影响,然而宏观模型不仅与固体推进剂细观组分实际形貌相距甚远,也无法定量解释界面对推进剂力学性能的影响与作用机制,因此近年来宏观模型往往需要与细观、微观模拟所得到的参数相结合,形成跨尺度多层次模拟方法,以获得更准确的力学模型。

3.2 基于唯象学的含界面损伤本构模型

基于唯象学的固体推进剂界面损伤本构模型是一种通过引入宏观损伤变量来描述复合固体推进剂宏观力学性能模型,模型的修正依赖于大量实验数据的拟合,以接近推进剂的实际宏观力学响应。1997年, Park和Schapery^[84]提出了2个分别代表孔洞扩展及剪切损伤的损伤变量S1与S2,基于热力学理论提出了具有时间依赖性损伤的粘弹性本构模型,该模型后来被Ha和Schapery推广至三维应力状态^[85],并实现为有限元模型^[86]。与此同时,Ozüpek等^[87]与Jung等^[88]分别提出了3种考虑非线性、界面脱粘以及材料软化等因素的各向同性本构模型与考虑mullins效应的具有粘弹性脱粘准则的本构模型,随后推广至三维应力情况并应用于有限元软件ABAQUS^[89], Kantor^[90]与Yun^[91]分别基于上述本构模型引入了新的损伤参数,将原有的本构模型推广至复杂载荷条件下。1998年, Duncan^[92]提出了一种适用于低速恒应变拉伸的包含

累积损伤的单轴非线性粘弹性本构方程,并成功模拟了3种高填充复合固体推进剂的单轴拉伸力学响应。Sullivan^[93]则使用伪应变来表示具有损伤的粘弹性本构方程,在形式上与Schapery模型相似。此后,许进升^[94]、Wang^[95]与Xu^[96]等都基于Park和Schapery的理论,分别建立了HTPB复合推进剂基于不同温度、应变范围的热损伤-粘弹性模型,结果表明模型在描述HTPB在各种温度、应变与载荷条件下的力学性能方面均具有较高的精度,但在描述HTPB非线性粘弹性段内部的松弛性能方面存在一些不足。基于唯象学的推进剂界面损伤非线性粘弹本构模型虽然可以在不涉及复杂的微观细节的情况下,有效地模拟材料的宏观力学响应,然而前文所提出的模型大多适用于单一的加载情况,而固体推进剂服役过程中往往存在复杂的动静载荷,此时基于唯象学的本构模型也因无法描述细观组分的演化,适用性有待商榷。根据文献[71],考虑界面脱粘的非线性粘弹本构如图5所示,其中Void部分表示引入的界面脱粘参数,而Hybrid部分则代表传统的混合非线性粘弹本构部分,将两部分串联后的本构模型能够较好地通过界面脱粘的影响描述推进剂整体的力学响应。

4 微-细-宏观多尺度数值模拟进展

为了更全面地理解并研究复合固体推进剂的界面

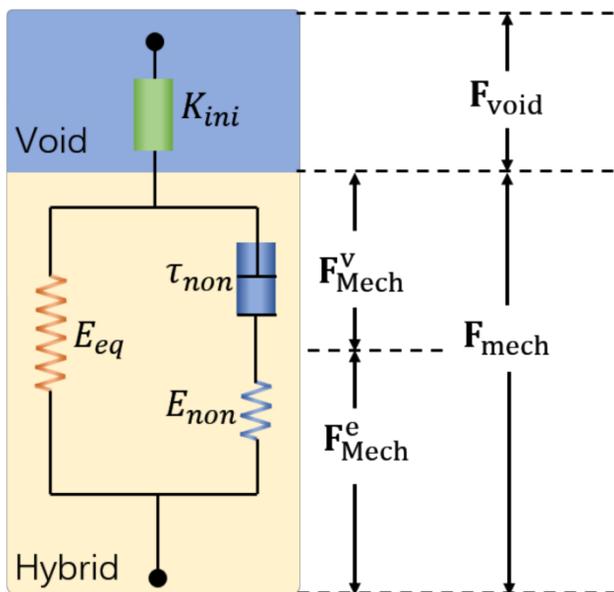


图5 考虑界面脱黏的非线性粘弹本构模型^[71]
 Fig.5 Nonlinear viscoelastic constitutive model considering interface debonding^[71]

性质对推进剂整体宏观力学性能的影响,往往需要结合微观、细观与宏观尺度下多种基础理论与方法,建立跨尺度的固体推进剂界面模型,将微尺度模拟得到的参数与结论应用于细观与宏观界面模型,使固体推进剂的微观、细观尺度的界面演化能够定量解释其宏观力学响应。根据各尺度联合应用方法的不同,多尺度模拟方法可以分为多层级分析方法与并发多尺度分析方法^[97],多层级方法一般指先将固体推进剂界面分为微观、细观与宏观层面,随后从微观尺度出发,选取关键的界面参数后逐级等效传递至宏观层面,得到推进剂的宏观力学响应;而并发多尺度分析方法则指在连续介质的界面模型的数值模拟中同时引入多个尺度的模拟并进行并行计算,最终得出具有能够描述固体推进剂在复杂载荷下定量描述微观界面演化对宏观力学响应的强普适性结论。

4.1 多层级分析方法

4.1.1 基于细观力学分析的含界面损伤宏观本构响应

基于细观力学中经典的Eshelby等效夹杂理论,Mori与Tanaka^[98]于1973年提出了一种利用平均场理论的思想并通过平均含混相和基体的物理性质建立宏观性质与细观结构之间关系的方法。由于M-T方法能够有效用于求解预测含球形颗粒夹杂的复合材料宏观性能响应,目前已被研究人员广泛用于研究固体推进剂界面损伤的跨尺度模拟中。Chen等^[99]结合Eshelby等效夹杂理论与M-T方法,推导了颗粒增强粘弹性复合材料与脱粘微孔隙的本构关系,发现宏观应变速率、粒径分散性、基体弛豫时间和界面黏结强度均对颗粒增强复合材料的整体力学性能起关键作用。Tan等^[100-102]采用并推广了M-T方法,研究了非线性界面脱粘对高颗粒体积分数的复合材料本构行为的影响,发现应变速率和温度对复合材料行为有很大影响,高应变速率和低温度使复合材料具有高强度,而温度效应则随着颗粒体积分数的增加而降低。Inglis等^[103]比较了基于包含M-T方法在内的经典细观力学理论与基于均匀化数学理论(Homogenization Method, MTH)的有限元实现这两方案关于界面脱粘问题对高填充复合材料本构响应的影响,运用了平面应变线性运动学对2种均质方案进行了讨论,得到了体积分、粒径和粒子间相互作用的影响。Geubelle等^[104]则采用了MTH理论,给出了高填充颗粒复合材料在单轴宏观应变作用下的损伤响应结果,揭示了复合材料中发生的复杂损伤过程与非线性宏观本构响应之间的直接关

系。根据文献[103],基于MTH的固体推进剂颗粒-基体多尺度模型如图6所示,展示了通过均匀化理论从微观结构等效获得固体推进剂宏观响应的方法。

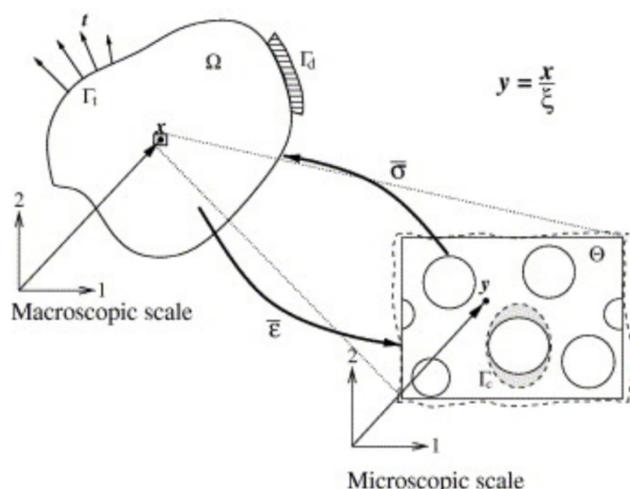


图6 基于均匀化数学理论的多尺度模型^[103]

Fig.6 Multi-scale model based on homogenization method^[103]

此外, Xiao等^[105]建立了基于真实晶体形态的有限元模型,并采用CZM来描述损伤,获取了各细观构件的裂纹参数和损伤单元分布,阐明了不同应变速率下裂纹扩展和损伤模式转换的机理。Wubuliansian等^[106]建立了考虑了粘弹性、应变率和软化效应的高伸长率硝酸酯增塑型聚醚推进剂的多尺度非线性粘弹性本构模型,通过改变RVE的微观尺寸,研究了由于界面剥离或基体本身破坏而引起的宏观损伤。伍鹏等^[107]利用对子模型边界在宏观模型中进行插值的方法建立了推进剂三点弯曲的多尺度模型,实现了三点弯曲试件宏观变形和裂纹尖端细观损伤的有效计算,得到的模型能够有效模拟推进剂三点弯曲试验宏观变形以及裂纹尖端细观损伤过程。Tan等^[100-102]推广的M-T方法虽然能够定量确定微尺度内聚定律中的关键参数,但并不能解释粒子之间复杂的相互作用与颗粒脱粘现象的关联,并且无法模拟颗粒体积分数大于50%的细观模型界面失效,因此距离实际工程应用有一定的距离。

4.1.2 基于“形态学方法”的多尺度模拟

Nadot与Nadot-Martin等^[108-109]开发出一种名为形态学方法(Morphological Approach, MA)的多尺度模拟理论,该理论基于整个细观结构(颗粒、粒间带、空间分布)的明确几何表征,其中每个粒间带都通过形态学参数进行标记和表征。MA方法将起始点与简化的运动学框架相结合,除了均质响应之外,还允许根据

局部形态访问局部场。MA方法源于Christoffersen提出的弹性高填充复合材料的多尺度框架,后来Nadot等^[110]将小应变粘弹性、有限应变、界面非线性损伤逐步纳入框架,引入了矩阵的粘弹性行为并考虑了有限变换,最终将全局和局部估计与不同微观结构的F.E.参考模拟进行了比较,以此证明了MA简化运动学基础的相关性。最后,考虑到不同阶段的非线性弹性行为,将颗粒/基体脱粘而产生的非演化界面损伤引入多尺度方法。之后,Dartois等^[111]考虑了损伤的演变和相关现象(刚度退化、诱导的各向异性和单侧效应等),对MA方法进行了改进,Trombini^[112]则对Dartois提出的改进MA方法进行了评估,以说明颗粒大小与颗粒之间的相互作用影响对界面脱粘的影响。经过Nadot团队多年对MA方法的完善与改进,相较于其他跨尺度模拟方法,MA方法能够明确地表示微观结构和连续捕捉形态学的显著特征,并且不需要等效的线性材料和相关的线性化方案,局部问题求解过程也相对简单。然而,在对于实际微观结构中缺陷位置和特征估计时,MA方法的准确性高度取决于微观结构对象转换为多面体过程的转换质量,作为一个相对于其他理论独立且模拟难度相对较高的特殊方法,该方法在推广的过程中存在一定困难。

4.2 并发多尺度分析方法

MesoDyn与耗散粒子动力学(Dissipative Particle Dynamics, DPD)是基于介观尺度的、以分子动力学为基础,但不考虑分子内部结构以及原子性质,而是将模拟系统中的原子/分子团簇进行粗粒化后,赋予粒子间以保守力与耗散力2种相互作用力的模拟方法;作为一种并发多尺度分析方法,MesoDyn与DPD方法都在介观尺度上赋予了材料的微观粒子性质,从而实现了跨尺度的并行运算。而MesoDyn与DPD方法的不同之处则在于MesoDyn是基于时间相关的金兹堡-朗道(Ginzburg-Landau)模型的平均场密度泛函理论方法,而DPD则是基于牛顿运动方程的模拟方法。Lan等^[43]采用MD与DPD模拟研究了二甲基海因(DMH)对GAP/RDX推进剂力学性能的影响,结果表明,GAP-DMH能够抑制RDX的团聚并提高分散性,扩大与RDX的接触面,从而提高GAP/RDX推进剂的力学性能。齐晓飞等^[113-115]利用MesoDyn研究了NG/NC与NC/DIANP等共混体系相结构及其演变过程的影响因素,结果表明微下的形貌特征与MesoDyn模拟得到的结果具有良好的一致性,在质量配比相同的NC/NG体系中,较高的温度能够改善体系的

混溶性,但温度达到 40 °C 后相分离现象消失。高杰等^[116]利用同样的方法研究了 Bu-NEPA/GAP 共混体系的影响,得到了 Bu-NEPA 质量分数对共混体系的影响。郭昕等^[117]对比研究了 DOA/HTPE 与 DPO/HTPE 共混体系的混溶性,其实验结果与 MesoDyn 模拟结果一致性较好。

根据文献^[43],图 7 展示了 DPD 方法相较于其他尺度模拟方法的优点,即通过 DPD 方法能够直观地得到 GAP-DMH 显著提高了 RDX 的分散性、增加了与 RDX 的有效接触面积的结论,从而从微观粒子性质角度阐述了二甲基海因接枝的 GAP 提高了 GAP/RDX 推进剂力学性能的原因。相比于 MD 模拟, MesoDyn 与 DPD 模拟的能够模拟的体系尺度更大、时间步长更长,因此能够从微观的角度体现出材料界面处的形貌演化,可以作为 MD 模拟的有效补充与辅助,然而这 2 种模拟方法虽然在高分子复合材料领域已被广泛运用,但目前应用于研究固体推进剂界面结构演化方面却较少,在未来需要基于这类模拟方法进行更多的研究。

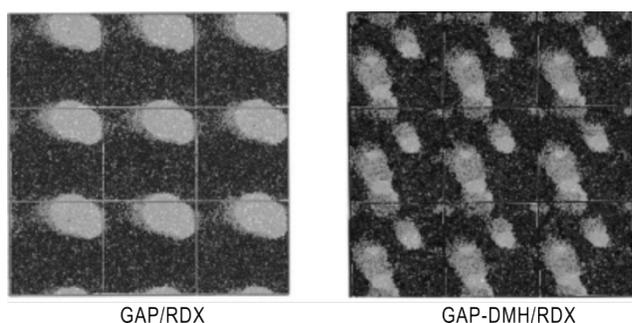


图 7 基于 DPD 的 GAP/RDX 和 GAP-DMH/RDX 中 RDX 的形态^[43]

Fig.7 Morphologies of RDX in GAP/RDX and GAP-DMH/RDX based on DPD^[43]

5 总结与展望

复合固体推进剂界面的力学性质、物化特性、损伤演化模式尤其是颗粒脱湿对推进剂的结构完整性有重要的影响,对界面的研究是预测推进剂宏观力学性能的重要手段,对固体发动机结构完整性分析和延长贮存寿命研究具有重要意义。通过不断深入的研究,国内外学者对固体推进剂界面进行了多尺度模拟分析,得到了丰硕的成果。对上述研究成果的总结与展望如下:

(1)在微观层面,对推进剂界面层各种基本特性,

如力学性能、界面结合能、对相关函数等都进行了深入研究与分析,大多数常用推进剂界面体系的参数都能通过查阅已有的文献得到;从这些基本参数出发,从化学键的角度在分子层级上揭示了这些参数的成因与影响,从晶体的角度出发阐述了界面失效的原因,最终能够在理论上指导推进剂组分的选择与配比。然而,目前对推进剂/衬层的界面层各种性质的研究相对较少,需要进一步完善;另外,分子动力学方法目前只能从纯理论的角度一定程度上指导宏观上推进剂的材料选择、配方设计、界面性能预测等问题,并且仍与宏观尺度的模拟与实验存在一定差距,例如同样需要关注的推进剂颗粒“脱湿”问题、界面的老化问题以及湿度对界面的影响,目前分子动力学模拟则很难涉及,其难点不仅在于目前的算力不足以支持对于分子动力学模拟更大体系的计算,也在于脱湿、老化等因素对界面的作用机理尚不明晰,理论体系尚未系统构建。由于复合固体推进剂体系是一个包含了固化剂、增塑剂、黏结剂等多种成分的复杂体系,这导致了基体-颗粒体系中的基体部分由于有多种组分不同相态的存在,其相互之间复杂的化学反应目前很难从微观分子角度相对完整地呈现出来,这不仅要求研究人员对于固体推进剂体系十分熟悉,更需要跨学科的知识储备,因而目前的研究很少考虑各种成分的综合影响,如基体间各成分的交联、固化反应以及实际得到的产物对界面层与颗粒产生的影响,导致模拟的结果常常会与事实产生较大的差距;

(2)在细观尺度下,对于细观填充的构建目前已经发展了一套相对成熟的方案,即使用代表性体积元作为固体推进剂细观数值仿真研究的对象,区别在于填充颗粒的算法与颗粒形状的不同;而对于界面层模型的构建,即在如何定义界面层性质的问题上,则需要考虑基体材料的性质区别,选用合适或特定的内聚力模型以贴合实验数据,但目前获取内聚力参数的方法大都选用了参数反演法,而未直接从实验获取或是从材料本身的性质出发获得参数,故而有待进一步研究。同时,该套方案的特点也在于细观有限元模拟方法实质上是对填充材料参数的几何结构建模进行数值模拟,导致不同种类的复合固体推进剂在模拟方法上大同小异,区别仅在于材料参数的不同,因此在该尺度下难以把不同种类的复合固体推进剂区分开来;而从另一个角度来看,这样的方案也提供了一个对复合固体推进剂进行细观数值模拟相对标准化的通用流程,对不同种类复合固体推进剂的研究具有一定的普适

性,提升了模拟研究的效率;

(3)在宏观尺度下,早期的宏观三相模型实质上是目前细观有限元模型的几何简化形式,因而也具有与细观有限元方案相似的特点;而由于目前微细观模拟与实验表征的普及,研究者已经对复合固体推进剂各项的微观细观形貌有了一定的认识,单纯的宏观三相模型已经难以受到认可并使用;基于唯象学的考虑界面损伤本构模型能通过引入损伤因子较好地描述材料的宏观力学响应,然而大多模型不适用于复杂载荷的条件,同时也存在无法联系材料细观界面演化与宏观力学响应的问题;

(4)在不同尺度模型的适用性方面,分子动力学模拟能够根据不同种类固体推进剂的界面模型计算得到针对该种体系的理论界面性质,并从微观粒子性质角度解释其原因;而细观与宏观模型则更多从材料的几何结构、数学关系出发,结合部分实验得到的参数,力求模拟得到的结果接近其真实宏观本构响应。因此,模拟原理与模拟目的的根本区别决定了微观尺度模型具有更强的针对性,而细、宏观尺度的模型则具有更强的普适与通用性;

(5)目前已有微观-细观与细观-宏观的跨尺度模拟方法,但却缺乏能够连接不同尺度间的关键参数进行材料性能的传递进行多层次的尺度分析,同时也缺乏并发多尺度分析的方法,因此,未来需要进一步将宏观、微观、细观3个尺度进行结合,例如直接从实验中测量内聚力和位移的关系,或是使用分子动力学填充有限元本构参数,最终得到宏观的力学本构响应。但目前分子动力学方法难以考虑各种宏观事实,如基体间各组分复杂化学反应的影响,因而仍需要一个系统并有效的方法来通过从材料本身的本征物理性质出发获得界面层的力学参数。

本文重点关注了复合固体推进剂界面的模拟研究进展,这对于理解和改进复合固体推进剂的材料选择、配方设计与界面力学性能具有较为重要的意义,也为未来的推进剂设计和应用提供了有力支持。

参考文献:

- [1] 周清春. 端羟基聚丁二烯推进剂/衬层界面粘接力学特性研究[D]. 南京:南京理工大学, 2016.
ZHOU Qing-Chun. Study on the adhesion mechanical properties of hydroxyl-terminated polybutadiene propellant/liner interface[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2016.
- [2] 韩龙. 复合固体推进剂细观损伤机理及本构模型研究[D]. 南京:南京理工大学, 2017.
HAN Long. Research on the mesoscopic damage mechanism and nonlinear viscoelastic constitutive model of composite propellant[D]. Nanjing: Nanjing University of Science and Technology, 2017.
- [3] 孙新雨. 高伸长率AP/Al/HTPB推进剂基体及填料-基体界面调节研究[D]. 长沙:国防科技大学, 2021.
SUN Xin-Yu. Study on matrix and filler-matrix interface of high elongation AP/Al/HTPB propellant [D]. Changsha: Graduate School of National University of Defense Technology, 2021.
- [4] 王誉蓉. PBT推进剂主要组份的表/界面特性及键合作用[D]. 长沙:国防科学技术大学, 2016.
WANG Yu-Rong. Surface, interface features and bonding effects in PBT propellants [D]. Changsha: Graduate School of National University of Defense Technology, 2016.
- [5] 李金飞, 黄卫东, 李高春, 等. 振动载荷和定应变对HTPB推进剂基体/颗粒粘接界面影响[J]. 固体火箭技术, 2016, 39(4): 503-508.
LI Jin-fei, Huang Wei-dong, LI Gao-chun, et al. Effects of vibration load and constant strain on the binder / particle adhesive surface of HTPB propellant [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2016, 39(4): 503-508.
- [6] ZHOU Qing-chun, CHEN X, NIU R-M, et al. Extraction of rate-dependent fracture properties of adhesive interface involving large-scale yielding [J]. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 2015, 29(11): 1118-1135.
- [7] LI Gao-chun, WANG Yu-feng, JIANG Ai-ming, et al. Micro-mechanical investigation of debonding processes in composite solid propellants [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2018, 43(7): 642-649.
- [8] ZHOU Ting-ting, ZYBIN S V, LIU Yi, et al. Anisotropic shock sensitivity for β -octahydro-1, 3, 5, 7-tetranitro-1, 3, 5, 7-tetrazocine energetic material under compressive-shear loading from ReaxFF-Ig reactive dynamics simulations [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(12).
- [9] LAN Yan-hua, ZHAI Jin-xian, LI Ding-hua, et al. Multiscale simulation on the influence of dimethyl hydantoin on mechanical properties of GAP/RDX propellants [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2014, 39(1): 18-23.
- [10] LI L H, WANG W, WEI B. First-principle and molecular dynamics calculations for physical properties of Ni-Sn alloy system [J]. *Computational Materials Science*, 2015, 99.
- [11] 韩龙, 许进升, 周长省. HTPB/IPDI复合固体推进剂细观界面率相关参数的反演识别研究 [J]. 含能材料, 2016, 24(10): 928-935.
HAN Long, XU Jin-sheng, ZHOU Chang-sheng. Inverse identification of the rate-dependent micro interface parameters of HTPB/IPDI composite propellant [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2016, 24(10): 928-935.
- [12] FENG Tao, XU Jin-sheng, HAN Long, et al. Modeling and simulation of the debonding process of composite solid propellants [J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2017, 220(1): 012020.
- [13] 孟胜皓, 俞卫博, 刘宏波, 等. 复合固体推进剂基体/填料界面研究现状 [J]. 化工新型材料, 2019, 47(1): 28-32.
MENG Sheng-hao, Yu Wei-bo, LIU Hong-bo, et al. Research progress on the matrix/filler interface of composite solid propellant [J]. *New Chemical Materials*, 2019, 47(1): 28-32.
- [14] 李悦, 李东峰, 张纲要, 等. HTPB/IPDI推进剂与衬层界面黏结

- 性能研究进展[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2021, 19(1): 16-22.
- LI Yue, LI Dong-feng, ZHANG Gang-yao, et al. Research progress of interfacial bonding performance between HTPB/IPDI propellant and liner[J]. *Chemical Propellants & Polymeric Material*, 2021, 19(1): 16-22.
- [15] ZOU Zi-jie, QIANG Hong-fu, LI Yi-yi, et al. Review on the dewetting of the particle-matrix interface in composite solid propellants [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2023, 48(3): e202200270.
- [16] KENDRICK J, ROBSON E, LEEMING W, et al. Molecular modelling of novel energetic materials [J]. *Waste Management*, 1998, 17(2): 187-189.
- [17] 杨明, 李高春, 邱欣, 等. 基于SEM原位拉伸的HTPB推进剂/衬层粘接界面破坏过程分析[J]. 含能材料, 2015, 23(6): 553-557.
- YANG Ming, Li Gao-chun, QIU Xin, et al. HTPB propellant/liner adhesive interface failure behavior based on SEM in situ tension [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2015, 23(6): 553-557.
- [18] 兰艳花, 刘亚青, 付一政, 等. 高能推进剂NEPE组分PEG与铝颗粒模型的分子动力学模拟[J]. 化学推进剂与高分子材料, 2009, 7(4): 49-51+4.
- LAN Yan-hua, LIU Ya-qing, FU Yi-zheng, et al. Molecular dynamics simulation on PEG and Al particle models of high energy NEPE propellant ingredient [J]. *Chemical Propellants & Polymeric Materials*, 2009, 7(4): 49-51+54.
- [19] 付一政, 刘亚青, 梅林玉, 等. HTPB与Al不同晶面结合能和力学性能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, (1): 187-190.
- FU Yi-zheng, LIU Ya-qing, MEI Lin-yu, et al. Molecular dynamics simulation on binding energies and mechanical properties of HTPB and different crystal faces of Al [J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2009, (1): 187-190.
- [20] 焦东明, 杨月诚, 强洪夫, 等. 键合剂对HTPB与Al/Al₂O₃之间界面作用的分子模拟[J]. 火炸药学报, 2009, 32(4): 60-63.
- JIAO Dong-ming, YANG Yue-cheng, QIANG Hong-fu, et al. Molecular simulation of effect of bonding agents on interface interaction for HTPB and Al/Al₂O₃ [J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2009, 32(4): 60-63.
- [21] MA Song, DU Wen-qian, LUO Yun-jun. Simulation of GAP/HTPB phase behaviors in plasticizers and its application in composite solid propellant [J]. *e-Polymers*, 2018, 18(6): 529-540.
- [22] DONG Ge, LIU Heng-zhi, DENG Lei, et al. Study on the interfacial interaction between ammonium perchlorate and hydroxyl-terminated polybutadiene in solid propellants by molecular dynamics simulation [J]. *e-Polymers*, 2022, 22(1): 264-275.
- [23] WANG Xi-jun, XIAO Ji-jun. Molecular dynamics simulation studies of the ϵ -CL-20/HMX co-crystal-based PBXs with HTPB [J]. *Structural Chemistry*, 2017, 28(6): 1645-1651.
- [24] 温彦威, 吴战武, 祁玮, 等. IPDI型HTPB推进剂/衬层/玻璃钢界面粘接增强设计[J]. 固体火箭技术, 2022, 45(5): 668-674.
- WEN Yan-wei, WU Zhan-wu, QI Wei, et al. Enhancement design for bonded interface of IPDI-HTPB propellant/liner/FRP [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2022, 45(5): 668-674.
- [25] ZHANG Ping-an, LI Tong-qing, LIU Si-meng, et al. Effects of NPBA on interface interaction and mechanical properties of NEPE propellant: Insight from molecular dynamics simulation [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 171: 109135.
- [26] ZHANG Ping-an, PANG Ai-ming, TANG Gen, et al. Molecular dynamics simulation study on the mechanism of NPBA enhancing interface strength of NEPE propellant [J]. *Applied Surface Science*, 2019, 493: 131-138.
- [27] 虞振飞. 高能固体推进剂相关组分物理相容性的分子模拟研究[D]. 北京: 北京理工大学, 2016.
- YU Zhen-fei. Investigation of physical compatibility of related components in novel high energy solid propellant by molecular simulation [D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2016.
- [28] LEI Di, FU Yi-zheng, HU Wen, et al. Molecular dynamics research on interfacial reinforcement between ϵ -CL-20 and polymeric bonding agents for humidity-insensitive solid propellant systems [J]. *Journal of Polymer Research*, 2021, 28(6): 215.
- [29] 朱伟, 刘冬梅, 肖继军, 等. NEPE推进剂/衬层结构-性能MD模拟(I)——简化模型界面固化反应展示和力学性能比较[J]. 固体火箭技术, 2014, 37(4): 530-534.
- ZHU Wei, LIU Dong-mei, XIAO Ji-jun, et al. Molecular dynamics simulations of the structures and properties of NEPE propellant/liner (I) —Illustrating curing reactions and comparing mechanical properties of the simplified models [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2014, 37(4): 530-534.
- [30] 朱伟, 刘冬梅, 肖继军, 等. NEPE推进剂/衬层结构-性能MD模拟(II)——复杂体系组分分子迁移和配方设计示例[J]. 固体火箭技术, 2014, 37(5): 678-683.
- ZHU Wei, LIU Dong-mei, XIAO Ji-jun, et al. Molecular dynamics simulation of the structures and properties of NEPE propellant/liner (II) —Demonstrating component molecule migrating and formulation for complex system [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2014, 37(5): 678-683.
- [31] 庞爱民, 池旭辉, 尹华丽. NEPE推进剂/衬层界面研究进展[J]. 固体火箭技术, 2018, 41(2): 181-189+202.
- PANG Ai-ming, CHI Xu-hui, YIN Hua-li. Recent advances on research of adhesive interfaces between NEPE propellants and HTPB liner [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2018, 41(2): 181-189+202.
- [32] 肖继军, 方国勇, 姬广富, 等. HMX基高聚物粘结炸药结合能和力学性能的模拟研究[J]. 科学通报, 2004, (24): 2520-2524.
- XIAO Ji-jun, FANG Guo-yong, JI Guang-fu, et al. Simulation study of bonding energy and mechanical properties of HMX-based polymers bonded to explosives [J]. *Chinese Science Bulletin*, 2004, (24): 2520-2524.
- [33] 马秀芳, 赵峰, 肖继军, 等. HMX基多组分PBX结构和性能的模拟研究[J]. 爆炸与冲击, 2007, (2): 109-115.
- MA Xiu-fang, ZHAO Feng, XIAO Ji-jun, et al. Simulation study on structure and property of HMX-based multi-components PBX [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2007, (2): 109-115.
- [34] 胡应杰, 黄玉成, 肖继军, 等. TATB/氟聚物PBX沿不同晶面力学性能的分子动力学模拟[J]. 中国科学(B辑化学), 2005, (3): 194-199.
- HU Ying-jie, HUANG Yu-cheng, XIAO Ji-jun, et al. Molecular dynamics simulations of the mechanical properties of TATB/

- fluoropolymer PBX along different crystalline surfaces[J]. *Scientia Sinica (Chimica)*, 2005, (03): 194-199.
- [35] 肖继军, 朱伟, 夏露, 等. 聚环氧乙烷-聚四氢呋喃及其共聚醚力学性能的MD模拟[J]. 火炸药学报, 2007, (4): 52-54.
XIAO Ji-jun, ZHU Wei, XIA Lu, et al. MD simulation of mechanical properties of poly(ethylene oxide), poly(tetrahydrofuran) and their copolyethers[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2007, (4): 52-45.
- [36] 夏露, 肖继军, 樊建芬, 等. 硝酸酯增塑剂力学性能和界面相互作用的分子动力学模拟[J]. 化学学报, 2008, (8): 874-878.
XIA Lu, XIAO Ji-jun, FAN Jian-fen, et al. Molecular dynamics simulation of mechanical properties and surface interaction for nitrate plasticizer [J]. *Acta Chimica Sinica*, 2008, (8): 874-878.
- [37] 朱伟, 肖继军, 郑剑, 等. 高能混合物的感度理论判别——不同配比和不同温度AP/HMX的MD研究[J]. 化学学报, 2008, 66(23): 2592-2596.
ZHU Wei, XIAO Ji-jun, ZHENG Jian, et al. A theoretical criterion for sensitivity of energetic composites—— molecular dynamics studies on AP/HMX systems at various concentrations and temperatures [J]. *Acta Chimica Sinica*, 2008, 66(23): 2592-2596.
- [38] WANG Meng, LI Xiao-dong, LI Shao-long, et al. Reinforcing effect of trifluoromethyl/amino-modified neutral polymeric bonding agents on interfacial bonding of fluoropolymer/nitramine energetic composites-based high-energy polymer bonded explosives [J]. *Iranian Polymer Journal*, 2023, 32(6): 729-737.
- [39] ZHU Wei, WANG Xi-jun, XIAO Ji-jun, et al. Molecular dynamics simulations of AP/HMX composite with a modified force field[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2009, 167(1): 810-816.
- [40] WANG Ning, PENG Jin-hua, PANG Ai-ming, et al. Thermodynamic simulation of the RDX-Aluminum interface using ReaxFF molecular dynamics[J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2017, 121(27): 14597-14610.
- [41] LAN Guan-chao, JIN Shao-hua, WANG Dong-xu, et al. Investigation of the effect of the CAB/A3 system on HNIW-based PBXs using molecular dynamics[J]. *Journal of Molecular Modeling*, 2018, 24(7): 186.
- [42] ZHANG Jiang, GAO Pei, XIAO Ji-jun, et al. CL-20/DNB co-crystal based PBX with PEG: molecular dynamics simulation[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2016, 24(8): 085008.
- [43] 李苗苗, 沈瑞琪, 李凤生. RDX/BAMO推进剂结合能、力学性质和能量性能分子动力学模拟(英文)[J]. 物理化学学报, 2011, 27(6): 1379-85.
LI Miao-miao, SHEN Rui-qi, LI Feng-sheng, et al. Molecular dynamics simulation of binding energies, mechanical properties and energetic performance of the RDX/BAMO propellant [J]. *Acta Physico-Chimica Sinica*, 2011, 27(6): 1379-85.
- [44] HANG Gui-yun, YU Wen-li, WANG Tao, et al. Theoretical investigations on stabilities, sensitivity, energetic performance and mechanical properties of CL-20/NTO cocrystal explosives by molecular dynamics simulation [J]. *Theoretical Chemistry Accounts*, 2018, 137(8): 114.
- [45] SONG Xue-yan, XING Xiao-ling, ZHAO Sheng-xiang, et al. Molecular dynamics simulation on TKX-50/fluoropolymer [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2020, 28(1): 015004.
- [46] 张丽娜, 李定华, 姚维尚, 等. GAP接枝海因与推进剂组分相互作用的分子模拟[J]. 推进技术, 2010, 31(5): 587-592.
ZHANG Li-na, LI Ding-hua, YAO Wei-shang, et al. Molecular dynamics simulation of interaction between GAP grafted hydantoin and solid oxidizers in for GAP propellant [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2010, 31(5): 587-592.
- [47] 崔瑞禧, 张炜. 硼酸酯键合剂分子结构及其与RDX晶面相互作用的理论研究[J]. 含能材料, 2012, 20(4): 459-464.
CUI Rui-xi, ZHANG Wei. Theoretical investigation of the structures of borate esters and their bonding interaction with RDX [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2012, 20(4): 459-464.
- [48] LAN Yan-hua, LI Ding-hua, ZHAI Jing-xian, et al. Molecular dynamics simulation on the binder of ethylene oxide-tetrahydrofuran copolyether cross-linked with N100 [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2015, 54(14): 3563-3569.
- [49] MENG Jun-Jiong, LUO Yi-ming, NIU Guo-tao, et al. Effect of additives on the interface binding strength of DNAN/HMX melt-cast explosives [J]. *Journal of Energetic Materials*, 2020, 38(4): 467-482.
- [50] 王晓倩, 李洋, 胡晓亮, 等. BDNPF/A增塑PET推进剂界面组分迁移及影响[J]. 固体火箭技术, 2022, 45(3): 392-398.
WANG Xiao-qian, LI Yang, HU Xiao-liang, et al. Interfacial component migration and influence factors of PET propellant plasticized with BDNPF/A [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2022, 45(3): 392-398.
- [51] 彭威, 周建平, 赵维昌, 等. 复合固体推进剂应力分布的数值模拟及损伤萌生分析[J]. 固体火箭技术, 2002, (1): 12-15.
PENG Wei, ZHOU Jian-ping, ZHAO Wei-chang, et al. Numerical simulation of stress distribution in composite solid propellant and damage emergence analysis [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2002, (1): 12-15.
- [52] 彭威. 复合固体推进剂粘弹损伤本构模型的细观力学研究[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2001.
PENG Wei. Fine-scale mechanical study of the intrinsic model of viscoelastic damage of composite solid propellants [D]. Changsha: Graduate School of National University of Defense Technology, 2001.
- [53] 封涛, 许进升, 陈雄, 等. 复合固体推进剂颗粒/基体界面参数反演优化[J]. 计算机仿真, 2018, 35(9): 25-30.
FENG Tao, XU Jin-sheng, CHEN Xiong, et al. Parameters inversion optimization of particles/matrix interface of composite solid propellants [J]. *Computer Simulation*, 2018, 35(9): 25-30.
- [54] 伍鹏, 李高春, 钱仁军. 固体火箭发动机推进剂/衬层/绝热层粘接界面细观损伤过程数值模拟研究[J]. 固体火箭技术, 2021, 44(3): 343-349.
WU Peng, LI Gao-chun, QIAN Ren-jun, et al. Numerical simulation study of meso-scale damage process of solid rocket motor propellant/liner/insulator adhesive interface [J]. *Journal of Solid Rocket Technology*, 2021, 44(3): 343-349.
- [55] 王广, 赵奇国, 武文明. 复合固体推进剂/衬层粘接界面细观结构数值建模及脱粘过程模拟[J]. 科学技术与工程, 2012, 12(30): 7972-7979.
WANG Guang, ZHAO Qi-guo, WU Wen-ming, et al. Meso-

- structure numeric modeling and debonding procedure simulation of composite solid propellant/liner bonding interface [J]. *Science Technology and Engineering*, 2012, 12(30): 7972-7979.
- [56] 董戈, 张炜, 周星, 等. 基于材料基因工程的AP/Al/HTPB推进剂单轴拉伸性能及脱湿过程计算[J]. *火炸药学报*, 2021, 44(3): 295-300.
DONG Ge, ZHANG Wei, ZHOU Xing, et al. Calculation of uniaxial tensile properties and dewetting evolution of AP/Al/HTPB propellant based on genetic engineering of materials[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2021, 44(3): 295-300.
- [57] SHEN Liu-lei, SHEN Zhi-bin, LI Hai-yang, et al. A Voronoi cell finite element method for estimating effective mechanical properties of composite solid propellants [J]. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 2017, 31(11): 5377-5385.
- [58] WANG Qi-zhou, WANG Guang, WANG Zhe-jun, et al. Biaxial tensile test and meso damage numerical simulation of HTPB propellant [J]. *Scientific Reports*, 2022, 12(1): 17635.
- [59] 武鑫. 高聚物粘结炸药(PBX)的细观力学行为模拟研究[D]. 绵阳: 西南科技大学, 2018.
WU Xin. Meso-mechanical behavior simulation study of polymer bonded explosive (PBX) [D]. Mianyang: Southwest University of Science and Technology, 2018.
- [60] BARENBLATT G I. The Mathematical Theory of Equilibrium Cracks in Brittle Fracture [M]. *Advances in Applied Mechanics*. Elsevier, 1962: 55-129.
- [61] DUGDALE D S. Yielding of steel sheets containing slits [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1960, 8(2): 100-104.
- [62] 张军. 界面应力及内聚力模型在界面力学的应用 [M]. 郑州: 郑州大学出版社, 2011: 5-8.
ZHANG Jun. Applied detonation physics [M]. Zhengzhou: Zhengzhou University Press, 2011: 5-8.
- [63] 张志成, 戴开达, 陈静静. 固体推进剂/衬层粘接界面脱粘失效的数值模拟 [J]. *科学技术与工程*, 2020, 20(28): 11421-11427.
ZHANG Zhi-cheng, DAI Kai-da, CHEN Jing-jing, et al. Numerical simulation of debonding of solid propellant/liner bonding interface [J]. *Science Technology and Engineering*, 2020, 20(28): 11421-11427.
- [64] 闫亚宾, 尚福林. PZT薄膜界面分层破坏的内聚力模拟 [J]. *中国科学(G辑:物理学 力学 天文学)*, 2009, 39(7): 1007-1017.
YAN Ya-bin, SHANG Fu-lin. Cohesive zone modelling of interfacial delamination in PZT thin films [J]. *Scientia Sinica (Physica, Mechanica & Astronomica)*, 2009, 39(7): 1007-1017.
- [65] NEEDLEMAN A. An analysis of tensile decohesion along an interface [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 1990, 38(3): 289-324.
- [66] HAN Bo, JU Yu-tao, ZHOU Chang-sheng. Simulation of crack propagation in HTPB propellant using cohesive zone model [J]. *Engineering Failure Analysis*, 2012, 26: 304-317.
- [67] CUI Hui-ru, SHEN Zhi-bin, LI Hai-yang. A novel time dependent cohesive zone model for the debonding interface between solid propellant and insulation [J]. *Meccanica*, 2018, 53(14): 3527-3544.
- [68] 丁伍, 许进升, 周长省, 等. HTPB推进剂/衬层界面 I 型破坏温度相关特性 [J]. *含能材料*, 2022, 30(2): 146-154.
DING Wu, Xu Jin-sheng, ZHOU Chang-sheng, et al. Type I failure temperature-dependent properties of HTPB propellant/liner interface [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hangneng Cailiao)*, 2022, 30(2): 146-154.
- [69] CUI Hui-ru, MA Wei-li. Mixed cohesive zone modeling of interface debonding between propellant and insulation [J]. *International Journal of Aerospace Engineering*, 2022, 2022: 8772468.
- [70] LI Yong-qiang, LI Gao-chun. Micro-damage analysis and numerical simulation of composite solid propellant based on in situ tensile test [J]. *Science and Engineering of Composite Materials*, 2023, 30(1).
- [71] LEI Ming, WANG Jian-jun, CHENG Ji-ming, et al. A constitutive model of the solid propellants considering the interface strength and dewetting [J]. *Composites Science and Technology*, 2020, 185: 107893.
- [72] MATOUS K. Finite element formulation for modeling particle debonding in reinforced elastomers subjected to finite deformations [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics & Engineering*, 2006, 196(1): 620-633.
- [73] MATOUS K, INGLIS HM, GU X, et al. Multiscale modeling of solid propellants: from particle packing to failure [J]. *Composites Science & Technology*, 2007, 67(7-8): 1694-1708.
- [74] DE FRANCQUEVILLE F, GILORMINI P, DIANI J. Representative volume elements for the simulation of isotropic composites highly filled with monosized spheres [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2019, 158: 277-286.
- [75] DE FRANCQUEVILLE F, GILORMINI P, DIANI J, et al. Comparison of the finite strain macroscopic behavior and local damage of a soft matrix highly reinforced by spherical or polyhedral particles [J]. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 2020, 84: 104070.
- [76] GU Xiao-yong, LIU Xiang-yang, DONG Chun-ying, et al. The mesoscopic numerical simulation of GAP/CL20/AP composite solid propellant based on MPM and FEM [J]. *Applied Sciences*, 2023, 13(7): 4552.
- [77] CUI Jia-yuan, QIANG Hong-fu, WANG Jia-xiang. Experimental and simulation research on microscopic damage of HTPB propellant under tension-shear loading [J]. *AIP Advances*, 2022, 12(8).
- [78] TOULEMONDE P-A, DIANI J, GILORMINI P, et al. On the account of a cohesive interface for modeling the behavior until break of highly filled elastomers [J]. *Mechanics of Materials*, 2016, 93: 124-33.
- [79] LI Tian-peng, XU Jin-sheng, HAN Jun-li, et al. Effect of microstructure on micro-mechanical properties of composite solid propellant [J]. *Micromachines*, 2021, 12(11): 1378.
- [80] 庞爱民. 复合固体推进剂过渡相(中间相)力学模型 [J]. *推进技术*, 1998, 19(5): 98-103.
PANG Ai-ming. Mechanical model of mesophase in composite solid propellants [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 1998, 19(5): 98-103.
- [81] 田德余, 洪伟良, 刘剑洪等. 丁羟固体推进剂力学性能模拟计算 [J]. *推进技术*, 2008, 29(1): 114-118.
TIAN De-yu, HONG Wei-liang, LIU Jian-hong, et al. Modeling for mechanical properties of HTPB solid propellant [J].

- Journal of Propulsion Technology*, 2008, 29(1): 114-118.
- [82] 贵大勇, 刘剑洪, 田德余. NEPE 高能推进剂力学性能模拟计算[J]. 推进技术, 2010, 31(4): 444-447+451.
GUI Da-Yong, LIU Jian-hong, TIAN De-yu, et al. Modeling of mechanical properties of NEPE high energetic propellants [J]. *Journal of Propulsion Technology*, 2010, 31(4): 444-451.
- [83] 张鑫. 高增塑高能固体推进剂力学性能研究[D]. 襄阳: 航天动力技术研究院, 2019.
ZHANG Xin. Study on mechanical properties of highplasticizing high energy solid propellants[D]. Xiangyang: The institute of aerospace chemistry and technology, 2019.
- [84] PARK S W, SCHAPERY R A. A viscoelastic constitutive model for particulate composites with growing damage [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 1997, 34(8): 931-947.
- [85] HA K, SCHAPERY R A. A three-dimensional viscoelastic constitutive model for particulate composites with growing damage and its experimental validation [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 1998, 35: 3497-3517.
- [86] HINTERHOEZL R M, SCHAPERY R A. FEM Implementation of a three-dimensional viscoelastic constitutive model for particulate composites with damage growth [J]. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2004, 8: 65-94.
- [87] OZUPEK S, BECKER E B. Constitutive equations for solid propellants [J]. *Journal of engineering materials and technology*, 1997, 119: 125-132.
- [88] JUNG G-D, YOUN S-K. A nonlinear viscoelastic constitutive model of solid propellant [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 1999, 36: 3755-3777.
- [89] TUNC B, OZUPEK S. Constitutive modeling of solid propellants for three dimensional nonlinear finite element analysis [J]. *Aerospace Science and Technology*, 2017, 69: 290-297.
- [90] KANTOR M M, ASSOUS F, GOLUBCHIK A, et al. Three-Dimensional constitutive equations for hyper viscoelastic particulate reinforced composite materials based on damage parameter [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 2021, 229: 111138.
- [91] YUN K-S, PARK J-B, JUNG G-D, et al. Viscoelastic constitutive modeling of solid propellant with damage [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 2016, 80: 118-127.
- [92] DUNCAN E J S, MARGESTON J. A nonlinear viscoelastic theory for solid rocket propellant based on a cumulative damage approach [J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 1998, 23: 94-104.
- [93] SULLIAN R W. Development of a viscoelastic continuum damage model for cyclic loading [J]. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2008, 12: 329-342.
- [94] XU Jin-shen, CHEN Xiong, WANG Hong-li, et al. Thermo-damage-viscoelastic constitutive model of HTPB composite propellant [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 2014, 51(18): 3209-3217.
- [95] WANG Zhe-jun, QIANG Hong-fu, WANG Guang, et al. Tensile mechanical properties and constitutive model for HTPB propellant at low temperature and high strain rate [J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 2015, 132(24): 42104.
- [96] XU Qiang, FANG Qin-zhi, SHA Bao-lin, et al. Study on a damage model of NEPE solid propellant based on a Weibull distribution [J]. *Mechanics of Time-Dependent Materials*, 2021, 1-16.
- [97] 陈玉丽, 马勇, 潘飞, 等. 多尺度复合材料力学研究进展 [J]. 固体力学学报, 2018, 39(1): 1-68.
CHEN Y-L, MA Yong, PAN Fei, et al. Research progress in multi-scale mechanics of composite materials [J]. *Chinese Journal of Solid Mechanics*, 2018, 39(1): 1-68.
- [98] MORI T, TANAKA K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions [J]. *Acta Metall*, 1973, 21: 571-574.
- [99] CHEN J-K, HUANG Z-P, MAI Y-W. Constitutive relation of particulate-reinforced viscoelastic composite materials with debonded microvoids [J]. *Acta Materialia*, 2003, 51(12): 3375-3384.
- [100] TAN H, HUANG Y, LIU C, et al. The Mori-Tanaka method for composite materials with nonlinear interface debonding [J]. *International Journal of Plasticity*, 2005, 21: 1890-1918.
- [101] TAN H, HUANG Y, LIU C, 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.
- [102] TAN H, HUANG Y, LIU C, et al. The viscoelastic composite with interface debonding [J]. *Composites Science and Technology*, 2008, 68: 3145-3149.
- [103] INGLIS H M, GEUBELLE P H, MATOUS K, et al. Cohesive modeling of dewetting in particulate composites: micro mechanics vs multiscale finite element analysis [J]. *Mechanics of Materials*, 2007, 39(6): 580-595.
- [104] GEUBELLE P H, INGLIS H M, KRAMER J D, et al. Multiscale modeling of dewetting damage in highly filled particulate composites [J]. *AIP Conference Proceedings*, 2008, 973(1): 196-202.
- [105] XIAO You-cai, GONG Tian-yuan, ZHANG Xiao-wei, et al. Multiscale modeling for dynamic compressive behavior of polymer bonded explosives [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2023, 242: 100807.
- [106] WUBULIAISAN M, WU Yan-qing, HOU Xiao, et al. Multiscale viscoelastic constitutive modeling of solid propellants subjected to large deformation [J]. *International Journal of Solids & Structures*, 2023, 262-263: 112084.
- [107] 伍鹏, 李高春, 王鑫. HTPB 推进剂三点弯曲过程试验与数值模拟 [J]. 含能材料, 2020, 28(6): 514-521.
WU Peng, LI Gao-chun, WANG Xin. Experimental and numerical simulation on the damage process of HTPB propellant at the crack tip [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao)*, 2020, 28(6): 514-521.
- [108] NADOT-MARTIN C, TRUMEL H and DRAGON A. Morphology-based homogenization for viscoelastic particulate composites: Part I: Viscoelasticity sole [J]. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 2003, 22: 89-106.
- [109] NADOT C, DRAGON A, TRUMEL H, et al. Damage modeling framework for viscoelastic particulate composites via a scale transition approach [J]. *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2006, 44: 553-583.
- [110] NADOT-MARTIN C, TOUBOUL M, DRAGON A, et al. Direct scale transition approach for highly-filled viscohyperelastic particulate composites: Computational study. In: Cazacu O (ed.) [J]. *Multiscale Modeling of Heterogeneous Materials: From Microstructure to Macroscale Properties*, 2008, London: ISTE/Wiley: 218-237.
- [111] DARTOIS S, NADOT-MARTIN C, HALM D, et al. Microme-

- chanical modelling of damage evolution in highly filled particulate composites e induced effects at different scales[J]. *International Journal of Damage and Mechanical*, 2013, 22(7), 927-966.
- [112] TROMBINI M, NADOT-MARTIN C, HALM D, et al. Multi-scale damage modelling with a “Morphological approach” to highlight particlesize effect in highly-filled particulate composites[J]. *European Journal of Mechanics A & Solids*, 2015, 53: 163-174.
- [113] 齐晓飞, 张晓宏, 郭昕, 等. NC/DINAP 共混体系力学性能的分
子动力学模拟计算[J]. 火炸药学报, 2013, 36(2): 57-61+81.
QI Xiao-Fei, ZHANG Xiao-hong, GUO Xin, et al. Molecular
dynamics simulation on mechanical properties of NC/DIANP
blends[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*, 2013,
36(2): 57-61+81.
- [114] 齐晓飞, 张晓宏, 张伟, 等. NC/NG 共混体系的塑化行为[J].
推进技术, 2013, 34(6): 843-848.
QI Xiao-Fei, ZHANG Xiao-hong, ZHANG Wei, et al. Plastici-
zation behavior of NC/NG blends [J]. *Journal of Propulsion
Technology*, 2013, 34(6): 843-848.
- [115] 齐晓飞, 闫宁, 严启龙, 等. 硝化纤维素+增塑剂共混体系相结
构的介观动力学模拟[J]. 火炸药学报, 2017, 40(6): 101-107.
QI Xiao-Fei, YAN Ning, YAN Qi-long, et al. Mesoscopic dy-
namic simulations on the phase structure of nitrocellulose /
plasticizers Blends[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propel-
lants*, 2017, 40(6): 101-107.
- [116] 高杰, 金大勇, 郭昕, 等. 含能增塑剂 Bu-NENA 与黏结剂共混
体系的介观动力学模拟[J]. 爆破器材, 2021, 50(6): 8-13.
GAO Jie, JIN Da-yong, GUO Xin, et al. Mesoscopic dynam-
ics Simulation of blends of energetic plasticizer Bu-NENA and
binder[J]. *Explosive Materials*, 2021, 50(6): 8-13.
- [117] 郭昕, 陈春燕, 牛余雷, 等. 端羟基聚醚/增塑剂共混体系混溶性
的介观动力学模拟[J]. 科学技术与工程, 2018, 18(18):
247-251.
GUO Xin, CHEN Chun-yan, NIU Yu-lei, et al. Mesoscopic dy-
namic simulations on the miscibility of hydroxyl-terminated
polytrher/plasticizers blends[J]. *Science Technology and Engi-
neering*, 2018, 18(18): 247-251.

Advancements in Multiscale Numerical Simulation of Composite Solid Propellant Interfaces

YU Tian-hao, YAN Ya-bin, WANG Xiao-yuan

(School of Mechanical and Power Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: As one of the mechanically vulnerable components in the structure of solid rocket motors, it is extremely important to clarify the physical and chemical properties of the interface for solid propellants, damage evolution patterns, and the effect of dewetting on the integrity of the propellant grain structure. Compared with experiments, numerical simulation can quickly and efficiently study the different physicochemical properties of various interface systems, and has good application prospects. From the microscale molecular dynamics that can reveal the mechanism of experimental phenomena from a molecular perspective, the mesoscale finite element numerical simulation considering the microstructure of complex filler particles and other materials in solid propellants, and the macroscopic numerical simulation closely related to the macroscopic mechanical response, the research progress of various interface mechanical properties for composite solid propellants was reviewed, the driving effect of numerical simulation for composite solid propellant interfaces at multiple scales on solid propellant engineering design at multiple scales and the current shortcomings were discussed, and the future development directions were also put forward.

Key words: solid propellants; interface; multiscale; numerical simulation

CLC number: TJ55;V512

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2023239

Grant support: National Natural Science Foundation of China (No.52275149)

(责编:王馨逸)