DOI:10.14077/j.issn.1007-7812.202507008

HMX 基 PBX 热循环响应与损伤演化机制

孙明杰,崔皓洋,康巨威,黄欣悦,侯聪花
(中北大学 环境与安全工程学院,山西 太原 030051)

摘　要:为系统研究 HMX 基 PBX 在热循环冲击下的热应力响应与损伤演化行为,以理论密度 90.10% 的 HMX 基 PBX 药柱为研究对象,利用 Abaqus 有限元软件模拟其在热载荷下的热应力分布规律,探讨由热应力引起的热损伤演化机制;同时结合扫描电镜(SEM)与工业 CT 对药柱进行细观表征,利用 Avizo 软件实现孔隙结构的可视化分析。结果显示,药柱在热冲击过程中出现温度梯度,伴随应力峰值迟滞;裂纹从外部向中心区域发生演化且扩展行为与热应力分布方向一致,热处理后孔隙率由 13.54% 升至 17.99%,孤立孔隙存在向连通孔隙发展的趋势。研究表明热应力是使 HMX 基 PBX 产生损伤演化的驱动因素。

关键词:材料力学;HMX 基 PBX;高聚物黏结炸药;热冲击;ABAQUS;孔隙演化
中图分类号:TJ55;TQ560　　**文献标志码**:A　　**文章编号**:1007-7812(2026)01-0055-10

Thermal Cycling Response and Damage Evolution of HMX-based PBX

SUN Ming-jie, CUI Hao-yang, KANG Ju-wei, HUANG Xin-yue, HOU Cong-hua
(School of Environment and Safety Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

Abstract: To systematically study the thermal stress response and damage evolution behaviors of HMX-based PBX under thermal cycle impact, taking 90.10% of theoretical density HMX-based PBX grains as the research object, the thermal stress distributions under thermal loading was simulated using Abaqus finite element software to explore the thermal damage evolution mechanism caused by thermal stress. Meanwhile, scanning electron microscopy (SEM) and industrial computed tomography (CT) were combined to perform mesoscopic characterization of the grains, and Avizo software was used to achieve visual analysis of the pore structure. The results show that the temperature gradients occur in the grains during thermal shock, accompanied by stress peak hysteresis. And the cracks evolve from the external to the central region, and their expansion behavior is consistent with the direction of thermal stress distribution. After the heat treatment, the porosity increases from 13.54% to 17.99%, and there is a trend for isolated pores to develop into connected pores. The study indicates that the thermal stress is the driving factor causing damage evolution in HMX-based PBX.

Keywords: material mechanics; HMX-based PBX; polymer bonded explosive; thermal shock; ABAQUS; pore evolution

引　言

高聚物黏结炸药(PBX)是由单质炸药晶体和高聚物黏结剂等组成的混合炸药,具有能量密度高、安全性能优异以及易于加工成型等优势,通常作为武器战斗部的核心能量部件应用于高效毁伤武器装备与系统[1,2]。在 PBX 的制备、存储、运输和服役过程中由于经常暴露在极端的温度环境下,温度波动引起材料内部产生热应力,会产生裂纹、孔隙等热损伤,损伤会使 PBX 的热力学性能劣化、机械感度提高等问题,严重影响服役安全性。

PBX 在复杂环境中的响应特性已成为目前重点研究问题,现有研究主要围绕热力学行为、损伤演化及结构稳定性展开分析。在数值模拟方面,Barua A 等[3]基于 XFEM 方法考虑 PBX 炸药的摩擦生热与结构失效等问题,模拟不同颗粒含量下炸药的应

收稿日期:2025-07-16;　　**修回日期**:2025-10-14
作者简介:孙明杰(2000－),男,硕士研究生。E-mail:smj4262626@163.com
通信作者:侯聪花(1974－),女,博士,教授。E-mail:houconghua@163.com
引用本文:孙明杰,崔皓洋,康巨威,等.HMX 基 PBX 热循环响应与损伤演化机制[J].火炸药学报,2026,49(1):55-64.
SUN Ming-jie, CUI Hao-yang, KANG Ju-wei, et al. Thermal Cycling Response and Damage Evolution of HMX-based PBX[J]. Chinese Journal of Explosives & Propellants(Huozhayao Xuebao),2026,49(1):55-64.

力—应变行为。韦兴文[4]与 Xiao Y 等[5]构建有限元模型对 PBX 热损伤过程进行仿真，验证数值模拟的可预测性。在实验研究层面，代晓淦等[6]发现 PBX 在 75 ℃ 条件下显著削弱其结构承载能力。唐明峰[7]和 Siyang LEI 等[8]从热循环角度出发，结合黏弹性理论模型分析其不可逆变形行为。Tang 等[9]通过快速风冷试验方法观察到 PBX 的黏流转变现象，补充了在温度载荷下材料行为的实验依据。在微观结构分析方面，Xu 等[10]通过微型计算机断层扫描技术(CT)观察 PBX 替代材料在双向压缩下的力学性能和裂纹扩展行为，定量分析裂纹扩展在不同约束压力下的演变过程。在非含能材料领域三维图像处理技术对孔隙网络的演化特性受到了关注，Harshini 等[11]结合 Avizo 软件对花岗岩经历温度循环后的孔隙网络特征，为含能材料在热冲击条件下的孔隙演化行为提供重要参考。

然而，目前尚不清楚 HMX 基 PBX 在热循环冲击条件下其响应机制是否出现新的行为特征，尤其在应力延迟、损伤累积及孔隙演化等方面。为此，本研究结合 XFEM 扩展有限元法与 Avizo 三维图像处理技术，进行 HMX 基 PBX 的热力响应模拟与损伤演化分析。对 HMX 基 PBX 在温度循环作用下的热力响应与损伤演化规律进行研究，从模拟与三维结构重建角度分析其损伤行为，揭示循环次数与应力分布、裂纹与孔隙演化之间的关联特征。为 HMX 基 PBX 在复杂温度场中的安全评估与优化提供理论支撑与仿真依据。

1 实 验

1.1 温度冲击实验

为研究 HMX 基 PBX 药柱在温度循环冲击过程中的热应力演化规律，对不同密度区间的装药进行对比分析，见表 1。选出热响应特征最显著的样品作为后续热力学研究的基础。

表 1 4 组 PBX 的密度值

Table 1 The density of PBX

sample	density/(g·cm^{-3})		relative density/%
	tested	theoritical	
B1	1.340	1.874	71.49
B2	1.592		84.93
B3	1.689		90.10
B4	1.810		96.56

所有样品均在常压下进行温度冲击试验，使用水浴热冲击的方法，将 HMX 基 PBX 置于样品袋中分别在冰水混合物(273 K)、热水(343 K)中各保持 15 min，经历 3 次循环，转换时间不超过 10 s。

1.2 样品制备与损伤表征

通过水悬浮造粒法制备 HMX 基 PBX 造型粉，经特制模具压制为直径 20 mm、高 4 mm 的圆柱形药柱。

样品微观形貌采用捷克 TESCAN 公司生产的 MIRA LMS 型扫描电子显微镜(SEM)进行观察，配备肖特基场发射电子枪和多种电子探测器，分辨率 1.2 nm@30 keV。测试前使用 QuorumSC7620 溅射镀膜仪喷镀铂金靶材(10 mA，45 s)；形貌观察与能谱分析的加速电压分别为 3 kV 和 15 kV。

三维孔隙结构表征使用天津三英精密仪器有限公司生产的 Nano Voxel 4000 型工业 CT 设备，扫描电压 110 kV，电流 110 μA，分辨率 10.5 μm。二维切片数据按照 10.5 μm 间距导出。

2 数值模拟

为进一步理解 HMX 基 PBX 药柱的热冲击响应机理，基于试验条件建立数值模拟，对 PBX 药柱在温度循环下的热应力演化规律进行模拟与分析。

2.1 本构模型

在对高分子黏结炸药进行研究时，其黏弹性特征使传统弹性模型难以准确描述其热力响应行为，为表征材料随时间变化过程中的行为，采用广义 Maxwell 模型的本构关系。Visco-SCRAM 模型作为其中之一的经典形式，由一个包含多个 Maxwell 体并联的黏弹性体和一个由 SCRAM 模型定义的微裂纹损伤体串联而成，本构模型如图 1 所示[12]。

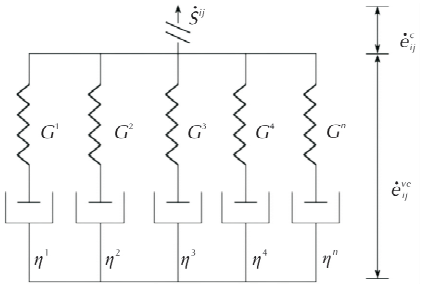


图 1 Visco-SCRAM 模型

Fig. 1 Visco-SCRAM model

应力率与应变率以球张量和偏张量形式表示。总应力率表示为偏应力率与平均应力率之和，即：

$$\dot{\sigma}_{ij} = \dot{S}_{ij} + \dot{\sigma}_m \delta_{ij} \tag{1}$$

$$\dot{\sigma}_m = K\,\dot{\varepsilon}_{ii} \tag{2}$$

式中：$\dot{\sigma}_{ij}$ 为总应力率；$\dot{S}_{ij}$ 为偏应力率；K 为体积模量；$\dot{\sigma}_m$ 为平均应力；δ_{ij} 为 Kronecker 符号；$\dot{\varepsilon}_{ii}$ 为应变

张量。

总应变率表示为偏应变率和平均应变率之和，即：

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{e}_{ij} + \delta_{ij}\dot{\varepsilon}_{m} \tag{3}$$

$$\dot{\varepsilon}_{m} = \frac{1}{3}\dot{\varepsilon}_{ii} \tag{4}$$

对于 N 个 Maxwell 体并联的黏弹性体，总的偏应变率与每个 Maxwell 体的偏应变率相等，总偏应力率为 N 个 Maxwell 体偏应力率之和；其中每个 Maxwell 体中偏应力率 $\dot{S}_{ij}^{(n)}$ 表示为：

$$\dot{S}_{ij}^{(n)} = 2\,G^{(n)}\,\dot{e}_{ij}^{ve} - \frac{S_{ij}^{(n)}}{\tau^{(n)}} \tag{5}$$

式中：$\dot{e}_{ij}^{ve}$ 为黏弹性偏应变率；$\tau^{(n)} = \eta^{(n)}/G^{(n)}$，$G^{(n)}$ 和 $\eta^{(n)}$ 分别为第 n 个 Maxwell 原件的剪切模量和黏性系数。

对于 Maxwell 体并联模型的性质，得到总的偏应力率为：

$$\dot{S}_{ij} = \sum_{n=1}^{N}\left(2\,G^{(n)}\,\dot{e}_{ij}^{ve} - \frac{S_{ij}^{(n)}}{\tau^{(n)}}\right) \tag{6}$$

需要指出的是，建立 Visco-SCRAM 本构模型时将 PBX 材料近似假设为各向同性材料。尽管 HMX 晶粒本身具有各向异性，但这一假设经 Dienes[13] 验证，其能够有效计算结果并保证模型收敛，并与实验进行对照得到相近的结果，因此在预测热应力场和裂纹扩展等宏观行为时是合理的假设。

2.2　有限元建模与材料参数

在 ABAQUS 软件中建立一个直径为 20 mm、高 4 mm的圆柱形样品如图 2 所示。采用单步热力耦合分析，同时求解 HMX 基 PBX 温度场与由温度梯度引起的热应力场。材料参数来自文献[14-16]HMX 基 PBX 热力学性能的研究结果，其中炸药的主要参数见表 2 和表 3。在此基础上，以样品 B4 做基准组，热力学参数均以该组数据做主要参考，其余密度分别做相应修正：弹性模量[15] 采用 Gibson-Ashby 关系式修正；泊松比做线性调整；热导率根据 $\lambda = \rho \cdot a \cdot C_p$[16] 计算，比热容与膨胀系数不随密度变化；黏弹性本构保持松弛时间不变，考虑不同密度影响，松弛模量 G_i 按照等效弹性模量比例进行修正。

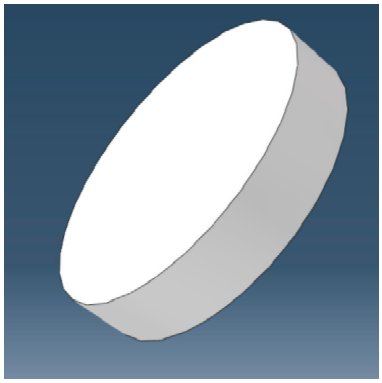


图 2　PBX 样品模型图

Fig. 2　Model diagram of PBX sample

表 2　HMX 基 PBX 主要性能参数

Table 2　Main performance parameters of HMX-based PBX

E/MPa	v	λ	C_p	T/K	$\alpha_1/10^{-5}\,\mathrm{K}^{-1}$
1410	0.3940	$\dfrac{1}{0.8896+0.00426T}$	$0.0134+3.3177\times10^{-3}T$	240—330	5.34 ± 0.18
				330—350	13.47 ± 2.45

表 3　HMX 基 PBX 黏弹性参数

Table 3　Viscoelastic parameters of HMX-based PBX

G_1/MPa	G_2/MPa	G_3/MPa	G_4/MPa	G_5/MPa	$\frac{1}{\tau_1}/\mathrm{s}^{-1}$	$\frac{1}{\tau_2}/\mathrm{s}^{-1}$	$\frac{1}{\tau_3}/\mathrm{s}^{-1}$	$\frac{1}{\tau_4}/\mathrm{s}^{-1}$	$\frac{1}{\tau_5}/\mathrm{s}^{-1}$
944.0	173.8	521.2	908.5	687.5	0	7.32×10^{3}	7.32×10^{4}	7.32×10^{5}	7.32×10^{6}

2.3　边界条件与温度加载方式

为贴合药柱在实际支撑条件下的工况，数值仿真模型在边界条件的设置中进行了合理简化与近似处理。具体而言，在 HMX 基 PBX 药柱底面施加纵向位移约束，保证在热冲击过程中药柱不会发生整体竖向位移；同时，在药柱顶面实施单点固定用于消除药柱可能出现的刚体漂移、旋转等非物理现象。该设置既保证药柱在温度载荷下的整体平滑，又为药柱在自由膨胀时提供足够自由度，避免由于边界条件过度约束而引入额外不合理的应力集中，以最大程度模拟实际热应力分布。温度条件采用循环温度场模拟外部热冲击条件，将温度载荷施加于药柱表面，幅值曲线如图 3 所示。

在仿真过程中，升、降及恒温阶段对应药柱内部温度与应力场的不断演化。其中各阶段对应为：当热载荷达到恒定值后，材料因温度变化引起热应力场与温度场发生动态变化。通过对各阶段应力的分布状态观察不同阶段材料内部热应力累积—

释放—再分布的规律。

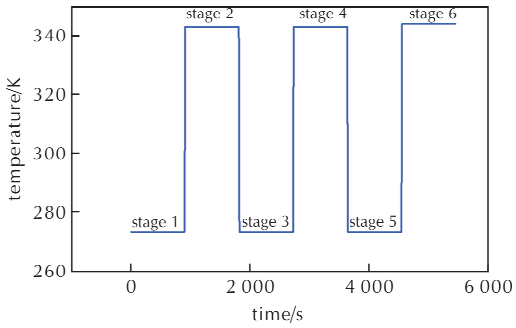


图 3 温度幅值曲线图

Fig. 3 Temperature amplitude curve

2.4 热-力耦合计算方法

当药柱各部分温度发生变化时，由于热变形将产生线应变，物体受到约束或物体各部分温度变化不均匀，使得物体热变形不能自由进行时，则会在物体内产生应力。物体由温度变化引起的应力为“热应力”或“温度应力”。热应力和温度变化密切相关，当温度场的改变已知，即药柱内的温度场是空间分布的已知函数，可以用 $T(x,y,z)$ 表示[17]。一般地，把由于热变形产生的应变看作是物体的初应变 ε_0，它在 3 个坐标方向上是完全相同的，可表示为：

$$\varepsilon_x = \varepsilon_y = \varepsilon_z = \varepsilon_0 = \alpha(T - T_0) \tag{7}$$

式中：α 为材料的线性膨胀系数；T_0 为药柱内部初始温度场；T 为结构的稳态或瞬态温度场。T 可由温度场分析的单元节点温度 T_i 通过插值求得，即：

$$T = N T^e \tag{8}$$

式中：N 为各单元上的插值函数；T^e 为节点温度。应力—应变关系表示成：

$$\sigma = D(\varepsilon - \varepsilon_0) \tag{9}$$

将式(9)代入虚位移原理的表达式，得到包括温度应变在内的用于求解热应力问题的最小位能原理。写为泛函数形式如下：

$$\Pi_p(u) = \int_{\Omega}\left(\frac{1}{2}\varepsilon^T D_\varepsilon - \varepsilon^T D_{\varepsilon_0} - u^T f\right)\mathrm{d}\Omega - \int_{\Gamma_\alpha} u^T \bar{T}\mathrm{d}\Gamma \tag{10}$$

将求解域 Ω 进行有限元离散，可得到求解方程：

$$Kd = P \tag{11}$$

式中：K 为热传导矩阵；d 为节点位移列阵；P 为温度载荷列阵。

3 有限元分析

为获得药柱在不同空间的热力响应特征，在药柱内部设 4 个监测点。因其在结构、载荷方面具有轴对称性，故在药柱切面选点时选择一侧做监测点，如图 4 所示。



图 4 药柱内部监测点

Fig. 4 Monitoring points inside the PBX column

通过 4 点观察热应力与热响应的变化规律，做药柱的热力响应分析。由于热应力在材料内部会引起裂纹扩展，通过热应力与温度梯度的变化预测材料发生结构变化的高风险位置并进行验证。

3.1 数值验证

为确保数值结果不依赖网格划分，本研究进行网格无关性分析。通过建立 3 种不同质量网格 M_1(粗)、M_2(中)、M_3(细)对 P2 位置进行收敛性探究，提取 P2 点的最大主应力进行对比，网格大小划分如图 5 所示，验证结果见表 4。

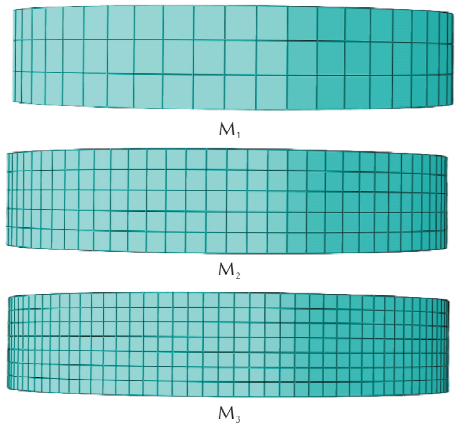


图 5 不同网格划分

Fig. 5 Different grid generation

表 4 不同网格下应力峰值

Table 4 Peak stress under different grids

type	size/mm	number of units	peak stress/MPa		
			1st peak	2nd peak	3rd peak
M1	0.10	1772	5.20	5.57	5.87
M2	0.08	3525	5.83	5.80	5.96
M3	0.06	8561	5.90	5.85	5.95

以 M3 为基准计算误差，分别提取 3 个阶段的热应力峰值。结果显示，M2 在 3 次结果中与 M3 相对偏差分别为 1.19%、0.86% 和 0.17%，均小于 2%；M2 与 M1 相比则存在较大偏差(≈11.9%)。综合考虑计算精度与计算成本选取 M2 作为计算模型。

3.2 热响应与应力变化特征

为研究 4 组不同密度 HMX 基 PBX 药柱在热冲

击条件下的热应力峰值状况，选取距中心与边距有一定距离的 P2 点进行分析，将 4 组药柱施加相同热载荷，如图 6 所示。仿真导出的数据显示，密度对热应力响应具有显著影响，B1～B4 药柱整体热应力峰值随密度增加而上升，低密度组 B1～B2 热应力水平整体偏低；其中 B3 药柱 3 次热循环中产生热应力峰值分别为 5.83、5.8、5.96 MPa，幅值处于较高水平且较为稳定；相比之下 B4 应力峰值呈现非单调变化且波动较大，变化规律相对复杂，综合考虑选取 B3 样品进行后续热力学分析。

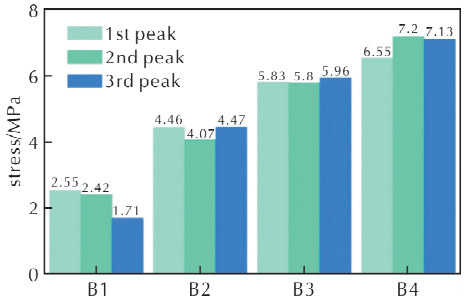


图 6　B1～B4 药柱热循环中热应力峰值

Fig. 6　B1—B4 Peak thermal stress in the thermal cycle of the column

3.3　热-力响应与损伤演化特征分析

3.3.1　热响应分析

通过有限元软件模拟计算得到 B3 药柱经历热冲击时的温度分布云图，如图 7 所示，经历阶段 2 的过程中药柱边缘温度达到 343 K，内部为 303.10 K，温差达到 39.90 K；阶段 3 的过程中药柱边缘温度达 273 K 时，内部 318.20 K，温差 45.20 K。其内部存在明显的温度梯度，温度梯度大的区域同时是热应力波动大的区域，也是裂纹出现的潜在位置。因此，温度场的分布特征为后续热损伤演化提供物理基础。

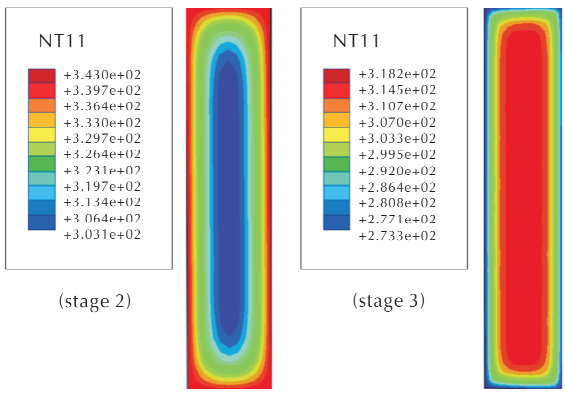


图 7　温度循环时各点温度变化

Fig. 7　The temperature changes at each point during the temperature cycle

在历史输出数据中得到药柱第一次温度转换时 *P*1、*P*2、*P*3 及 *P*4 点在温度转换过程中温度随时间变化的曲线图，见图 8。

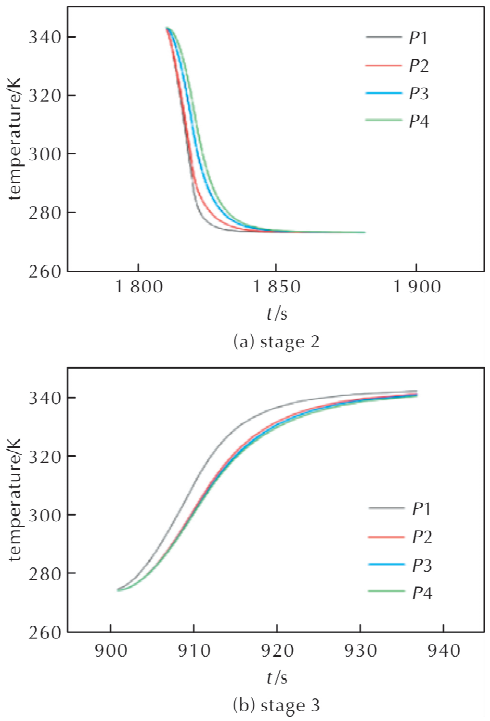


图 8　*P*1～*P*4 温度变化

Fig. 8　Temperature changes of *P*1—*P*4

阶段 2 升温阶段前期，温度上升速率较快，测点 *P*1、*P*2、*P*3 及 *P*4 在 913 s 分别达到 326.11、317.54、316.43、315.78 K，最大差值达 10.33 K；阶段 3 中在降温阶段前期，温度下降速率较快，*P*1、*P*2、*P*3 及 *P*4 在 1819 s 时的温度分别为 287.42、292.93、307.09、315.45 K，最大温差达 28.03 K；无论是降温或升温阶段，变化率快于其余三点，在前期温度梯度较大，随着时间增加，热量由表面向内部传递，四点的温度梯度逐渐变小最终趋于热平衡。

温度梯度较大时，不同位置热膨胀系数不同，膨胀程度存在差异，药柱内部产生显著应力差，即温度场分布的非均匀性是影响热应力分布的重要因素；应力场的分布特征又进一步反应材料内部发生损伤演化的高风险区域。

3.3.2　热应力分析

在热循环过程中对多个监测点的应力历史数据进行提取对比，获得热应力变化规律，如图 9 所示。

在冷热交替过程中，根据 B3 药柱四点在阶段 2 经历温度转换后 25 s 内的应力变化趋势，对 *P*1～*P*4 的应力历史数据进行研究。分析得到，四点经热冲击后应力同步升高但峰值与出现时间存在明显差异，*P*1、*P*2、*P*3 及 *P*4 点峰值分别为 4.15、5.82、5.33、4.67 MPa。*P*1 位于表层较快暴露于外部的温度突变，热应力上升最为迅速，与其余三点应力峰值出现的时间点存在明显差异。相比之下其余位置由于热量传递由表及里存在一定滞后。

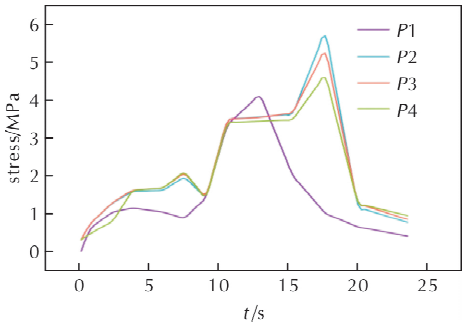


图 9 阶段 2 药柱四点应力变化

Fig. 9 Four-point stress change of the medicine column at stage 2

值得注意的是，应力的大小并未呈现随着位置的深入呈现单调递增的趋势，表现为“*P*2 最大，随后逐渐减小”的分布特征。当热量由表及里传递时，外部区域既受到热量影响又因为达到热平衡导致温度梯度在 *P*2 附近达到最大；同时，PBX 属于黏弹性材料，热应力的分布不仅取决于温度瞬态的变化，中层在温升过程中“既受表层约束又未完全松弛”状态，黏弹性滞后效应进一步强化应力集中现象。随热量传递温度梯度平缓，内部黏弹响应相对充分，峰值逐渐下降。

其应力分布规律在图 10 的热应力分布中得到进一步验证。阶段 2 时，药柱表层呈现压应力，内部则以拉应力为主，且最大值位于 *P*2 附近 6.41 MPa。阶段 3 则表现相反趋势，中心转为压应力，表层为拉应力。

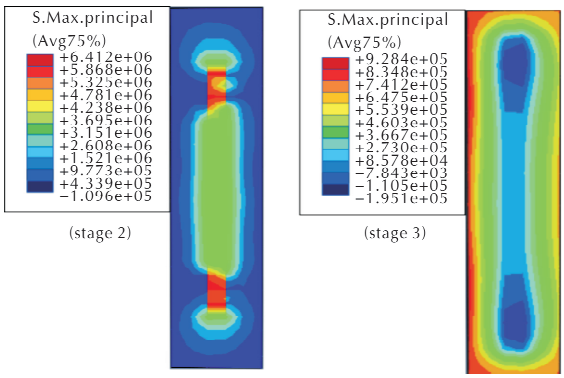


图 10 温度转换时的应力分布

Fig. 10 Stress distribution at temperature transition

由于温度转换期间，药柱外部首先受热发生膨胀，而此时药柱内部温度低，膨胀程度相对较小，此时表面受到内部未充分膨胀的约束导致出现压应力，内部受到表面部分的拉扯产生拉应力。拉、压应力的产生实质是由于热量传递在空间上的非均匀性导致，不同温度下热膨胀系数的不同使得膨胀程度出现差异，出现方向相反的应力响应。根据断裂力学理论，拉应力是促使Ⅰ型（张开型）裂纹萌发的主要应力形式，此外在药柱 *P*2 位置出现明显的应力集中区域，表明该区域为药柱发生结构破坏的高风险位置。

图 11 为 B3 药柱在整个温度冲击过程中出现的应力延迟现象。选取 *P*2 节点对阶段 2、4、6 的应力延迟现象作图，横坐标以温度转换时刻为基准。在温度发生转变时应力峰并没有同步出现，三次升温阶段与两次降温阶段所产生的应力峰存在明显的时间滞后现象，较温度转换时刻分别延迟了 17.61、37.56、57.15 s。

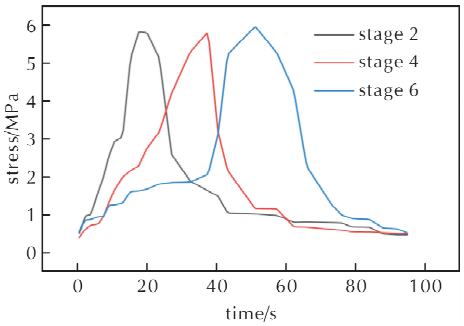


图 11 应力分布趋势延迟

Fig. 11 Stress distribution trend delay

PBX 作为典型黏弹性材料，应力响应不仅与当前温度场相关，而且受历史加载进程影响。经典数学表达常采用 Boltzmann 叠加原理，即任意多步应变导致的综合应力为每一时刻 t_i 的应变导致的应力的简单线性叠加[18]。在广义 Maxwell 模型经典黏弹性理论中，应力—应变关系包括时间卷积项：

$$\sigma(t) = \int_0^t G(t-\tau)\,\dot{\varepsilon}(\tau)\mathrm{d}\tau \qquad (12)$$

其中 $G(t)$ 为松弛函数，表明应力响应存在“记忆效应”，应力演化受到过去应变影响，导致应力响应对于温度变化存在相位差。也就是说，其热膨胀引起的瞬态应变不会立刻转化为等量的应力响应，而是受到松弛过程影响。另一方面，热量由药柱表面向内部进行传导，而热应力产生的数值大小与温度梯度在空间上的分布相关，热量传递出现的时间差也导致了应力峰值的延迟出现。随着循环次数的增加，滞后效应愈发明显，既反映了材料的黏弹性特征，也意味着热应力在循环过程中不断累积，从而热损伤发生进一步演化。

3.3.3 损伤演化分布

为模拟热应力作用下 HMX 基 PBX 的损伤演化过程，在仿真过程中引入扩展有限元法（XFEM），该方法能够模拟药柱在不预设初始路径的状态下捕捉其由于热冲击产生的裂纹与扩展行为，可有效反

应其在热循环中表现出的裂纹演化趋势。损伤准则选用最大主应力损伤准则，有关于材料断裂参数取自文献[4，19]，拉伸强度为 6.08 MPa(294 K)、4.08 MPa(343 K)，断裂能 G_f 为 324 N/m。

经有限元软件对 HMX 基 PBX 药柱进行热冲击求解分析，获得药柱整体的缺陷演化分布图，如图 12 所示为无预制裂纹萌生与扩展的演化过程。结果显示，药柱在热冲击过程中表现出结构损伤的演化特征。材料表面由于直接接触温度突变而产生较大热应力，在达到损伤阈值后出现裂纹，随着时间推移逐渐向内部进行扩展。

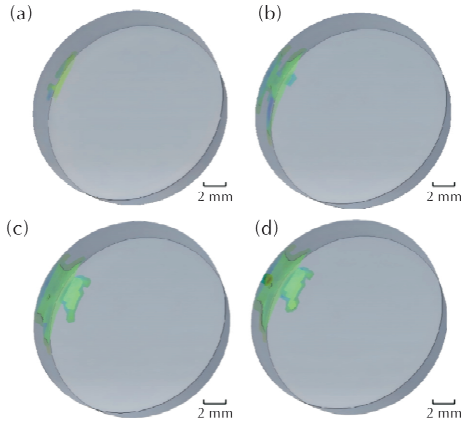


图 12　HMX 基 PBX 裂纹扩展

Fig. 12　Crack propagation of HMX-based PBXs

由此可看出，在热冲击初期，药柱表面首先接触温度突变环境而产生显著温度梯度和热应力集中现象，在 *P*2 区域形成极大值区，促使裂纹萌生。HMX 基 PBX 药柱的热膨胀行为首先受到约束且应力发生累积并突破材料拉伸极限，出现初始裂纹；随温度冲击的持续进行，温度梯度向内部传递，裂纹沿主应力方向发生进一步扩展并逐渐向内演化，最终形成一个完整的扩展路径，这与应力分布状况形成相互印证。整个仿真过程呈现出裂纹扩展由外部区域向内延伸，随着热冲击的次数叠加，裂纹在原有基础上进行小幅度的扩展，材料经历“应力累积—裂纹扩展—不可逆损伤”的渐进过程，即热应力对 PBX 的破坏具有累积性与不可逆性。

4　实验验证

4.1　扫描电镜

借助扫描电镜对 HMX 基 PBX 进行微观形貌表征，图 13 展示了热处理前后的药柱表面形貌对比，并捕捉到了经热处理后药柱表面的裂纹分布与孔隙的演化图。

如图 13 所示，a1 为未经热处理的 HMX 基 PBX 药柱表面，材料整体致密，颗粒分布均匀且未出现较为明显的微裂纹，浮于表面的细小颗粒为 HMX 晶体在压制过程中裸露在外，但整体表面相对完整；a2 为局部放大图，可以看到表面存在压制过程中产生的微小裂纹。b1 则是经历热处理后的 HMX 基 PBX 药柱表面扫描电镜图，部分区域出现裂纹互相贯穿且整体结构趋于松散；在局部放大图 b2 中，明显看到颗粒之间的孔隙增大、颗粒脱落，其中由于黏结剂在热循环中的软化作用及药柱在热冲击过程中热应力集中使晶体与黏结剂之间的相互作用减弱，导致其孔隙进一步扩大。

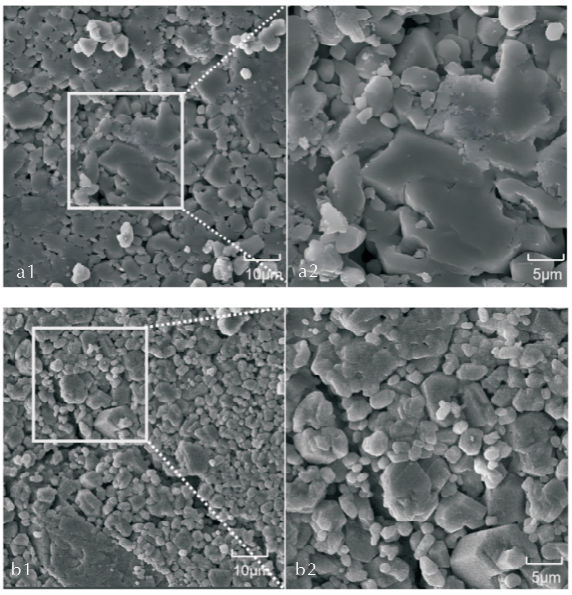


图 13　热冲击前后药柱表面电镜图

Fig. 13　SEM images of the surface of the column before and after thermal shock

4.2　工业 CT 结果分析

4.2.1　损伤演化特征分析

原始药柱(C1)和热处理后的药柱(C2)，经 CT 扫描后的断层切面图见图 14。

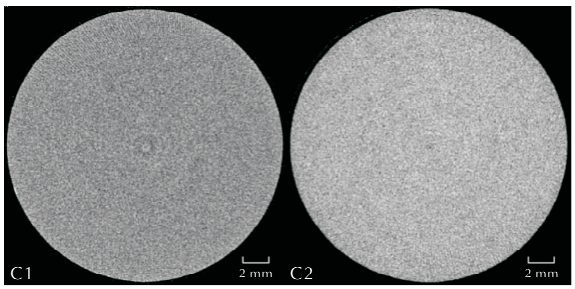


图 14　C1、C2 切面对比

Fig. 14　Comparison of C1 and C2 cutting surfaces

药柱切面图分为黑、灰、白 3 种颜色，黑色代表孔隙、灰色代表黏结剂，白色为 HMX 颗粒。经二者对比可知，白色区域明显增多，即 HMX 颗粒与黏结剂发生脱粘，结构更为松散。对 C2 出现的裂纹进行进一步勾描，见图 15。

a2 为提取出的主要裂纹，分布特征显示边缘裂纹较多，经热冲击后裂纹向内进行延伸，这与 XFEM 展示的裂纹萌生区域表现一致。从形态来看，边缘的裂纹普遍更粗但颜色较深，靠近中心的裂纹则相对较细、颜色较浅。整体来看，裂纹的扩展演化主要受热应力驱动，演化路径表现为由外向内逐渐扩展。与模拟结果相比，可发现模拟中仅出现边缘裂纹，而图中处于药柱中心的红色标记的裂纹可能与压制药柱过程中残余应力叠加热冲击作用共同诱发有关。

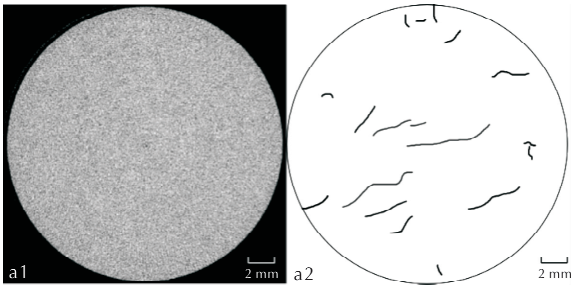


图 15 热处理后 CT 图像

Fig. 15 CT image after heat treatment

通过 AVIZO 对原始数据其进行灰度值调整，增强不同色块之间的对比度，使孔隙与基体部分产生强烈对比；随后通过阈值分割逐步过滤白色与灰色区域，仅保留孔隙区域。经分割后图像进行三维重建获得孔隙在药柱内部的空间分布特征，在此基础上对得到的孔隙结果进行定量分析。具体过程如图 16 所示，其完整展示了从原始图像的灰度处理、阈值分割到孔隙提取。

对提取出的三维孔隙进行孔隙率的计算，分别计算得到 C1、C2 的处理数据见表 5。由表 5 可得，C1、C2 的平均孔隙率分别达到 13.54% 与 17.99%，经热处理后孔隙率明显增大，其中 C1、C2 最大值均表现在药柱表面，可能与压制药柱时产生的机械损伤和表面 PBX 颗粒优先接触外部环境发生氧化分解有关；单个孔隙体积方面，C1 平均值在 3.79×10^{17} μm^3，而 C2 达 5.75×10^{17} μm^3，对应所占像素为 5.75×10^5 voxel，说明孔隙结构呈现多样化，并非单一的孤立孔隙；两组样品的方差说明孔隙体积分布总体相对均一；从峰度结果可知，对于标准正太分布的峰度为 3[20]，而 C1、C2 药柱的孔隙峰度分布达到 28.8 与 18.3，为“尖峰型”，表示其绝大部分孔隙为小体积，只有少部分孔隙呈大体积。

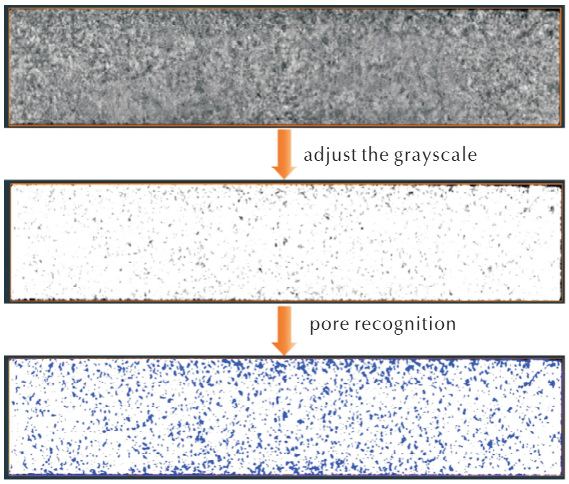


图 16 孔隙提取过程

Fig. 16 Pore extraction process

表 5 孔隙计算结果

Table 5 Porosity calculation results

sample	φ / %			$V/10^{17}$ μm^3			$N/10^5$ voxel			variance	kurtosis
	average	max	min	average	max	min	average	max	min		
C1	13.54	80.10	8.96	3.79	22.4	2.51	3.79	22.46	2.51	0.007	28.88
C2	17.99	91.08	13.09	5.75	27.6	3.96	5.75	27.60	3.96	0.010	18.50

注：φ 为孔隙率；V 为单个孔隙体积；N 为单个孔隙所占像素数

选取药柱模型 C2 中心位置处尺寸为 5 mm × 5 mm × 5 mm 的立方体区域做局部分析，对孔隙类型进行分类渲染并放大展示，分为孤立孔隙和连通孔隙，表面孤立孔隙在热应力作用下向内部逐渐发生连通演化形成连通孔隙，将两种孔隙进行分离进行放大渲染，见图 17。

孤立孔洞集中表现在表面，表现为椭球状孔洞，结合表 5 可知数量众多且体积较小，由于压制过程中产生不可避免的机械损伤与局部黏结剂脱粘，与电镜表征中观察到细小孔隙一致；连通孔隙表现为药柱内部连续分布，形成结构复杂的空腔网络状。产生机制与热应力集中致使微裂纹聚集有关，孔洞相互融合形成连通孔隙，成为裂纹可能发生偏转或分支的高风险区。空腔结构对药柱热传导路径、结构完整性影响较大，成为影响热力学性能的重要因素。其中 C1、C2 各层孔隙率分布曲线如图 18 所示，呈“U”型分布。二者表面孔隙率均为最大，C1 整体孔隙低于 C2，随着向内部区域延伸，孔隙率迅速下降并稳定。边缘区域高孔隙率不止由热应力所产生，在压制过程中的孔隙也被囊括其中；内

部孔隙率趋于稳定，根据仿真结果显示为应力集中区域所导致的损伤，该曲线阐述了药柱在试验过程中不同的失效机制共同作用的结果。

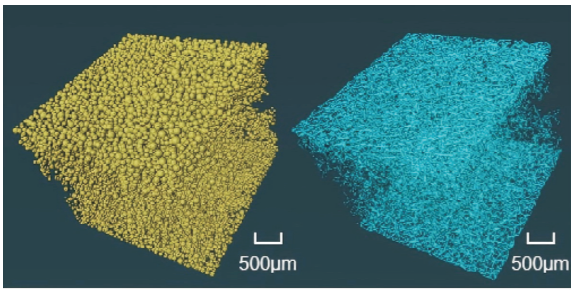


图 17　不同类型孔隙渲染

Fig. 17　Different types of pore rendering

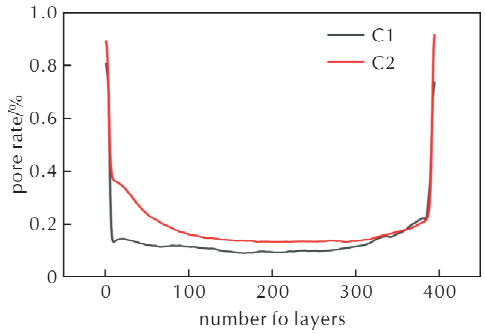


图 18　径向孔隙率分布图

Fig. 18　Radial porosity distribution

需要指出的是，在有限元仿真中，由于药柱的建模处于理想状态，被视为均质体。不同于实验中在压制药柱的过程会产生不可避免的机械损伤与初始缺陷；其仿真结果显示的是温度场和应力场不均导致缺陷的演化路径，因此主要集中于药柱外部区域并向内扩展。相比之下，实验结果中表面的孤立孔隙、界面粗糙度和微小裂隙在热冲击中易成为应力的集中点，从而改变裂纹起始位置与演化方式。另一方面，材料在试验过程中的实际热力学参数与仿真中较为理想化的数值同样存在偏差，导致仿真与实验结果存在不一致现象。

因此，二者差异不仅限于模型均质化，同时也包括界面效应、初始缺陷分布及性能参数等多方面影响。尽管存在不可避免的差异，但二者共同反应了 PBX 材料在服役过程中多因素共同作用的复杂损伤机制。在未来的工作中可通过引入多相材料，如分别定义晶体与黏结剂的材料参数，并在二者交界处引入界面单元以考虑缺陷分布，从而更直观展现界面脱粘、裂纹萌生等现象。

5　结　论

（1）模拟结果表明，药柱在热循环过程中出现显著温度梯度，最大温差达 45.2 K，靠近边缘区域出现应力集中区域；XFEM 进一步验证裂纹演化趋势与热应力分布一致。

（2）实验结果显示，热处理后的药柱结构不再致密，孔隙增大，且孔隙体积分布相对均一，表面孤立孔隙向内部演化形成连通孔隙，影响药柱的结构完整性。

（3）仿真与实验联合分析表明，热应力驱动裂纹由表及里扩展，并促使表面孤立孔隙连通化，形成裂纹-孔隙耦合损伤网络。

利益冲突声明/Conflict of Interests

所有作者声明不存在利益冲突。

All authors disclose no relevant conflict of interests.

参考文献：

[1] VOELKEL S J，ANDERSON E K，SHORT m，et al. Effect of lot microstructure variations on detonation performance of the triaminotrinitrobenzene（TATB）-based insensitive high explosive PBX 9502 [J]. *Combustion and Flame*，2022，246：112373.

[2] ZENG C，YANG Z，LIU J，et al. Study on mechanical improvement of CL-20 energetic co-crystals based PBX by surface modification [J]. *Propellants，Explosives，Pyrotechnics*，2023，48(4). DOI：10.1002/prep.202200154

[3] BARUA A，HORIE Y，ZHOU M . Energy localization in HMX-estane polymer-bonded explosives during impact loading[J]. *Journal of Applied Physics*，2012，111(5)：399-586

[4] 韦兴文，吴束力，唐兴. HMX 基 PBX 炸药热损伤的数值计算与实验研究[J]. 火炸药学报，2014，37(4)：9-13.
WEI Xing-wen，WU Shu-li，TANG Xing. Numerical calculation and experimental study on thermal damage of HMX-based PBX explosives[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants*（*Huozhayao Xuebao*），2014，37(4)：9-13.

[5] XIAO Y，FAN C，WANG Z，et al. Coupled mechanical-thermal model for numerical simulations of polymer-bonded explosives under low-velocity impacts[J]. *Propellants，Explosives，Pyrotechnics*，2020. DOI：10.1002/prep.201900345.

[6] 代晓淦，于劭钧，黄风雷，等. 常温和 75℃ 条件下 PBX-2 炸药射弹撞击响应特性[J]. 含能材料，2017，25(8)：683-688.
DAI Xiao-gan，YU Shao-jun，HUANG Feng-lei，et al. Impact response characteristics of PBX-2 explosive projectile under normal temperature and 75℃ [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*，2017，25(8)：683-688.

[7] 唐明峰，温茂萍，涂晓珍，等. 高温及机械应力对 PBX 力学行为的影响规律及机理分析[J]. 含能材料，2018，26(2)：150-155.

TANG Ming-feng, WEN Mao-ping, TU Xiao-zhen, et al. Effects of high temperature and mechanical stress on the mechanical behavior of PBX [J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2018, 26(2): 150-155.

[8] LEI S, WANG S, LU F, et al. Research on irreversible growth mechanism of PBX due to thermal cycling[J]. *E3S Web of Conferences*, 2021. DOI: 10.1051/E3SCONF/202125701051.

[9] TANG M, WANG S, LI M. Thermal shock behavior of polymer bonded explosive below and above the viscous flow transition temperature[J]. *IOP Conference Series Materials Science and Engineering*, 2020, 774: 012044.

[10] XU P, XIE S, CHEN H E, et al. Mechanical p-roperty and damage evolution of polymer-bonded explosive substitute under biaxial compression[J]. *International Journal of Applied Mechanics*, 2019. DOI: 10.1142/S175882511900339.

[11] HARSHINI R D G F, GAMAGE R P, KUMARI W G P. The role of thermal cycling in micro-cracking development and flow alteration: advanced insights from CT and lab studies [J]. *Gas Science and Engineering*, 2024, 125: 205280.

[12] 戴开达,陈鹏万.高聚物黏结炸药损伤断裂的数值模拟[M].北京:北京理工大学出版社,2020.

[13] DIENES J K, KERSHNER J D. Multiple-shock initiation via statistical crack mechanics[R]. [S.l.]: Office of Scientific & Technical Information, 1998.

[14] JOEL G. BENNETT and KEITH S. HABERMAN and JAMES N. JOHNSON and BLAINE W. ASAY. A constitutive model for the non-shock ignition and mechanical response of high explosives[J]. *Journal of the Mechani-cs and Physics of Solids*, 1998.

[15] 王竟成,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. Prediction of effective elastic modulus of PBX based on Voronoi mesonumerical model[J]. *Chinese Journal of Energetic Materials*, 2017, 25(7): 546-551.

[16] 韦兴文,周筱雨,王培,等.温度对 HMX 基 PBX 炸药热膨胀系数和热导率的影响[J].火炸药学报,2012,35(3):33-37.
WEI Xing-wen, ZHOU Xiao-yu, WANG Pei, et al. Effect of temperature on thermal expansion coefficient and thermal conductivity of HMX-based PBX explosive[J]. *Chinese Journal of Explosives & Propellants* (*Huozhayao Xuebao*), 2012, 35(3): 33-37.

[17] 胡于进,王璋奇.有限元分析及应用:有限元分析及其应用[M].北京:清华大学出版社,2009

[18] 卢宇源,安立佳,王健.高分子黏弹性的经典唯象模型[J].高分子学报,2016(6):688-697.
LU Yu-yuan, AN Li-jia, WANG Jian. Classical image model of polymer viscoelasticity[J]. *Acta Polymerica Sinica*, 2016(6): 688-697.

[19] 戴开达,李生涛,陈鹏万.基于 XFEM 的 PBX 炸药巴西实验断裂行为研究[J].北京理工大学学报,2018,38(2):111-117.
DAI Kai-da, LI Sheng-tao, CHEN Peng-wan. Research on the fracture behavior of PBX explosives based on XFEM in Brazil[J]. *Transactions of Beijing Institute of Technology*, 2018, 38(2): 111-117.

[20] DECARLO L T. On the meaning and use of kurtosis[J]. *Psychological Methods*, 1997, 2(3): 292-307.