

力载作用下基于 CT 原位表征的 TATB 造型粉颗粒体系力学行为演化研究*

陶杰¹⁾²⁾ 李海宁¹⁾ 戴斌¹⁾ 蓝林钢¹⁾ 郭菲¹⁾ 张伟斌¹⁾ 聂福德^{1)†}

1) (中国工程物理研究院化工材料研究所, 绵阳 621999)

2) (中国工程物理研究院研究生院, 北京 100081)

(2025 年 3 月 4 日收到; 2025 年 5 月 23 日收到修改稿)

TATB 是目前安全性能最好的炸药, TATB 造型粉颗粒经压制成型的高聚物黏结炸药 (PBX) 在军事中具有重要的应用. 在应力作用下, TATB 造型粉颗粒体系的演化决定了成型药柱的微观结构和整体质量. TATB 造型粉颗粒体系在力载作用下的结构演化和力学特性变化难以表征. 本研究采用 X- μ CT 层析成像与同步原位力载相结合的方法, 通过对 CT 图像处理与分析, 建立了 TATB 造型粉颗粒体系的三维孔隙网络模型, 基于该模型获得了接触数量、接触面积、接触强弱、配位数等关键特征参量的演化特性. 结果表明, 0—5 MPa 下, 随着应力的增加, TATB 造型粉颗粒体系中颗粒接触数量呈下降趋势, 减少率为 53.3%; 总接触面积减少率为 31.5%, 但强弱接触占比几乎维持不变; 颗粒体积平均增加率为 45.50%, 平均配位数由 7.27 增至 9.44. 本研究揭示了颗粒在成型过程初期的力学行为演化规律, 实现了颗粒体系力载过程的三维、定量、原位分析, 对炸药颗粒压制过程的力学特性的认识有重要科学意义和工程意义.

关键词: TATB, 三维颗粒体系, CT 图像处理, 力学行为

PACS: 45.70.-n, 83.80.Fg, 75.50.Tt, 07.05.Pj

DOI: 10.7498/aps.74.20250272

CSTR: 32037.14.aps.74.20250272

1 引言

三氨基三硝基苯 (1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene, TATB) 是目前安全性能最好的炸药, 以 TATB 和 高分子黏结剂制备的造型粉颗粒经压制成型获得的高聚物黏结炸药 (polymer bonded explosive, PBX) 在军事中具有重要的应用^[1-4], 如美国基于 TATB 的配方 PBX-9502 和 LX-17 用于核战斗部装药. TATB 基造型粉在模压成型时, 经模具约束的 TATB 造型粉颗粒会经历受力、变形、融合及致密化等一系列演化过程, 深入研究并揭示成型过程中颗粒体系演化特性对

压制 PBX 成型结构、性能影响的规律与机理, 对高性能 PBX 成型制造具有重要的科学意义和工程应用价值.

目前, 颗粒体系的研究方法主要是理论计算模拟和实验测试. Hertz^[5] 从理论上将颗粒接触分为法向接触和切向接触, 建立了经典颗粒接触理论模型. Chang 和 Liao^[6]、Tordesillas 等^[7] 基于连续介质本构模型, 采用二元接触准则分别建立了颗粒物质本构模型, 具有工程应用方便的特点, 但难以得到颗粒接触关系及颗粒体系的内部信息. Andrade 等^[8] 从颗粒基本尺度及运动学等角度出发, 提出了高能断层扫描成像技术, 从而能更精确地测量颗粒运动学和推断接触力. Coppersmith 等^[9] 考虑周期

* 中国工程物理研究院化工材料研究所学科基金 (批准号: SXK-2022-15) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: niefude@caep.cn

性的边界条件以及压力在竖直方向上的传递, 引进一个在 0 到 1 之间分布的随机权值数 q , 建立了一个应力的随机扩散模型—— q 模型, 但并未对颗粒堆积中竖向力扩散进行定量分析. Silva 和 Rajchenbach^[10] 通过光弹实验发现二维块状颗粒体系接触力分布呈现抛物线形且加载点即为抛物线顶点, 该结果与 q 模型符合性较好, 但光弹法需要使用具备双折射效应的材料. Andrade 和 Avila^[11] 利用颗粒单元法实现了对不规则形状天然颗粒材料中的粒子间接触力计算. Hurley 等^[12] 改进了颗粒单元法并进行了相关的实验验证, 给出了包含粒子力学控制方程反问题的精确数学公式, 为计算三维及任何颗粒材料中的粒子间力提供了一个通用框架. 美国能源部、劳伦斯利弗莫尔国家实验室的 Zhai 等^[13] 利用数值模拟与实验相结合的方法获得了均质蓝宝石颗粒体系在外力作用下的力链结构及超声波传播路径、衰减等声学典型特征参量演化特性. 上述理论计算和数值模拟方面的局限性在于对研究对象的假设或限制较高, 仅适用于钢珠、玻璃球、蓝宝石等刚性、均质(无缺陷)、同粒径的颗粒物质, 或橡胶球^[14] 等纯弹性颗粒物质.

颗粒体系的实验测试主要分为接触式和非接触式. 电子天平称重法^[15]、显色灵敏复写纸压痕法^[16] 等接触式测量法具有精度高、抗干扰性差、实验技术要求高等特点. 为提高抗干扰能力, 光弹应力分析法^[17]、荧光共聚焦显微镜法^[18]、磁共振弹性成像法^[19] 及计算机层析成像 (computer tomography, CT) 技术得到了快速的发展. 此外, 在三维研究中, 目前几乎处于定性或半定量的研究状态, 难以获得定量、准确的数据. 随着 CT 技术、实验力学技术、图像处理技术等交叉学科的发展, 用于探究颗粒内部结构及颗粒体系整体特性的手段逐渐被广大学者研究. 高分辨 CT 技术在分析微观、细观、介观、宏观等多尺度问题及三维表征、定量分析方面上得到大量的应用^[20-25]. 在炸药领域中, CT 技术被广泛用于炸药的检测与表征, 如检测裂纹、气孔、夹杂物等, 既具有无损、三维、多尺度的优点, 又存在工序繁琐、成本高、安全防护要求高等不足. 此外, 在获得的 CT 图像处理与分析中, 伪影、信噪比低、图像质量不佳等问题依然是现阶段研究的重难点. 马寅翔等^[26] 利用 CT 技术对单颗 TATB 造型粉颗粒开展了颗粒微细观结构的研究, 获得了单颗粒物理结构及力学参量, 但该研究局限于单颗粒,

对整个颗粒体系的研究不足. 戴斌^[27] 利用 CT 技术结合离散元方法研究了 TATB 造型粉颗粒体系的冷模压过程, 通过将 TATB 造型粉颗粒体系简化为二维、刚性、圆盘模型, 获得了压制过程中颗粒间的接触力和位移矢量.

TATB 造型粉颗粒 (0.8—3 mm) 是 TATB 粉末晶体 (0.1—10 μm) 由高分子黏结剂黏结造粒形成的颗粒材料, 具有多组分、黏弹性、形貌不规则、粒径非均匀、内部存在缺陷、力学性能各向异性等特点. TATB 基 PBX 成型制造时, 颗粒可能发生流动、摩擦、挤压、旋转、变形等行为, 呈现出复杂的力学行为.

本研究采用 X- μ CT 层析成像技术结合原位同步加载技术, 利用 CT 图像处理方法, 通过建立 TATB 造型粉颗粒体系的三维孔隙网络模型 (pore network model, PNM), 获取力载作用下每个颗粒的精准位置及演化特性, 分析力载过程中 TATB 造型粉颗粒体系的力学行为, 从而实现 TATB 造型粉颗粒体系的三维、定量、原位、过程在线表征与分析研究.

2 实验

2.1 实验材料与设备

实验对象为 TATB 造型粉颗粒 (由 95% TATB 晶体及 5% 高分子黏结剂组成, 见图 1), 由中国工程物理研究院化工材料研究所生产. 实验加载腔模具有 2 种, 分别为圆柱形 $\Phi 20 \text{ mm} \times 10 \text{ mm}$ 、方形 $15 \text{ mm} \times 15 \text{ mm} \times 15 \text{ mm}$, 材质为有机玻璃. 力学加载装置为天津三英精密仪器有限公司生产的原位 Microtest 装置, 实验设备为该公司高精度相衬 CT.



图 1 TATB 造型粉颗粒

Fig. 1. TATB particles.

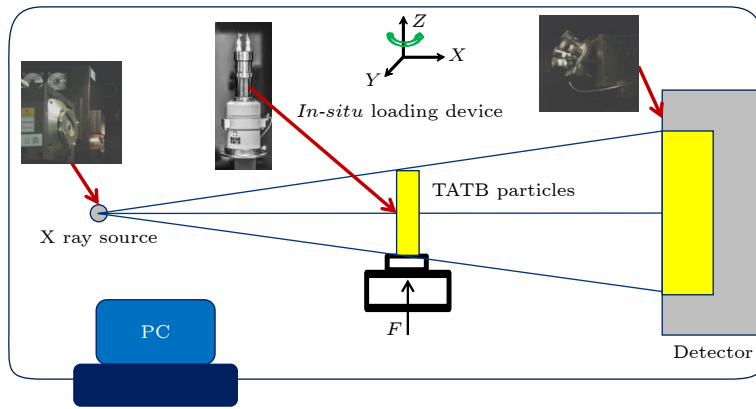


图 2 TATB 造型粉颗粒原位加载
Fig. 2. The *in-situ* loading of TATB particles.

2.2 原位力学加载与 CT 扫描

本文采用的实验系统如图 2 所示,开展原位力学加载 2 个不同系列试验,加载实验以压力为分组指标. 系列 1 为压制全载荷实验. 设计实验加载压力分别为 0, 3, 5, 10, 20, 30, 40, 60 MPa 等 8 个加载状态,采用圆柱形模具加载,材质为有机玻璃,加载速率为 0.1 mm/min. 系列 2 为压制低载荷实验. 设计实验加载压力分别为 0, 1, 2, 3, 4, 5 MPa 等 6 个加载状态,采用方形模具加载,材质为有机玻璃,加载速率为 0.1 mm/min.

CT 扫描电压为 80 kV, 电流为 125 μ A, 曝光时间为 3 s. 图像采集过程中,射线源发出 X 射线穿过加载装置及内部颗粒体系,在每一个加载状态下,样品台旋转 360°,平板探测器每隔 3 s 接收一组信号,得到相应的二维断层灰度图像,组合重构后得到三维数字体图像. 获得的体素尺寸为 18.4 mm,图像像素为 1024 \times 1024 \times 1024.

3 CT 图像处理及孔隙网络模型

3.1 CT 图像处理

经 CT 扫描获得的 TATB 造型粉颗粒体系原始图像存在信噪比低、对比度差、视野较暗等情况,因此需要对原始 CT 图像进行处理. 针对 TATB 这种多组分、黏弹性、非均质的特殊颗粒体系,采用图 3 所示的颗粒体系图像处理的方法,主要包括图像预处理、算法运算、模型数据分析等.

针对原始 CT 图像,首先通过 Volume edit 算法对加载腔模具进行边界切除,获得 TATB 造型粉颗粒体系图像的感兴趣区域 (region of interest,

ROI), 再通过填充颗粒内部孔隙、移除图像噪声点的方法,实现图像的阈值分割. 采用非线性滤波中的二次中值滤波方法,以全体像素值的中值代替像素点的像素值,结合双边滤波,实现了颗粒内部噪声去除、颗粒与颗粒之间噪声去除、颗粒边缘清晰的目的. 为了将 TATB 造型粉颗粒体系中同种颗粒物质分离为不同个体,采用分水岭算法 [28,29] 进行处理. CT 图像处理切片及 3D 重建图像分别见图 4 和图 5 所示.

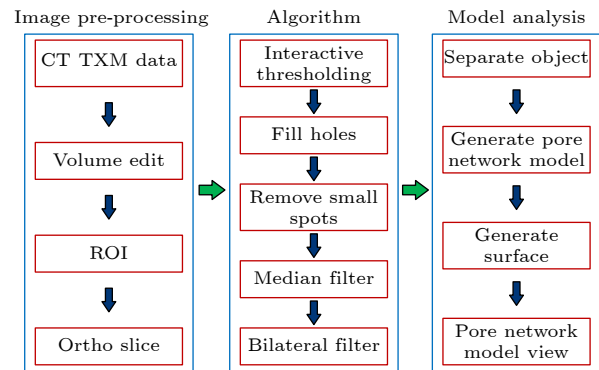


图 3 CT 图像处理算法流程

Fig. 3. Flow chart of CT image processing algorithm.

3.2 孔隙网络模型的构建

三维孔隙网络模型 (PNM) 是研究颗粒体系的有力工具 [30-32], 本文将原始 CT 图像二值化处理后,利用中轴线算法寻找孔隙和孔喉,将图像进行骨架化处理 [33-35], 基于形态细化算法和距离变换图像算法,通过分析骨架获得孔隙、孔喉中心坐标,计算孔隙空间体积,得到空间半径,如图 6 和图 7 所示.

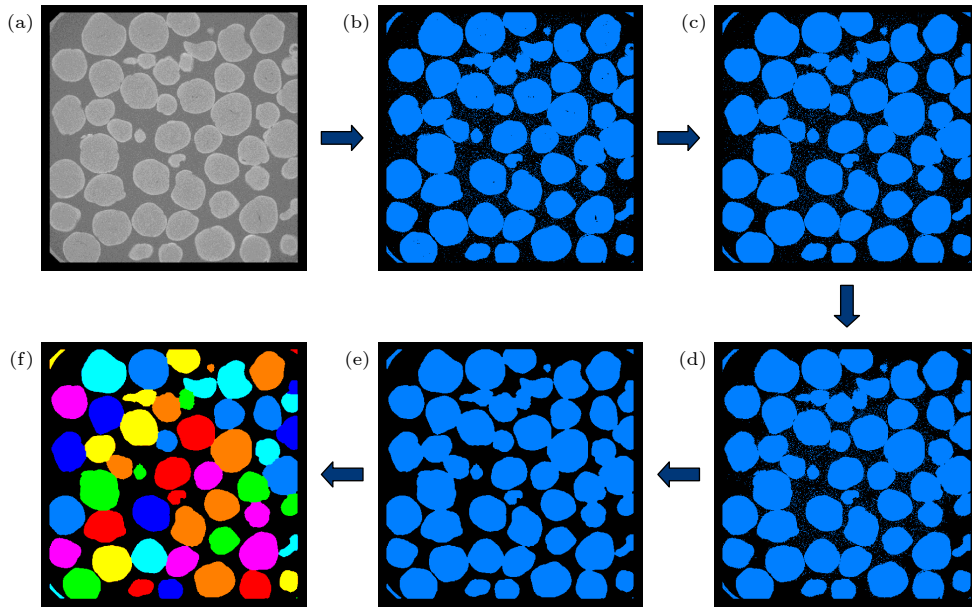


图 4 TATB 造型粉颗粒体系的图像处理 (切片) (a) 感兴趣区域; (b) 交互式阈值分割; (c) 孔隙填充; (d) 移除噪点; (e) 中值滤波及双边滤波; (f) 目标分离

Fig. 4. Image processing of TATB particle system (slice): (a) ROI; (b) interactive thresholding; (c) fill holes; (d) remove small spots; (e) median filter and bilateral filter; (f) separate object.

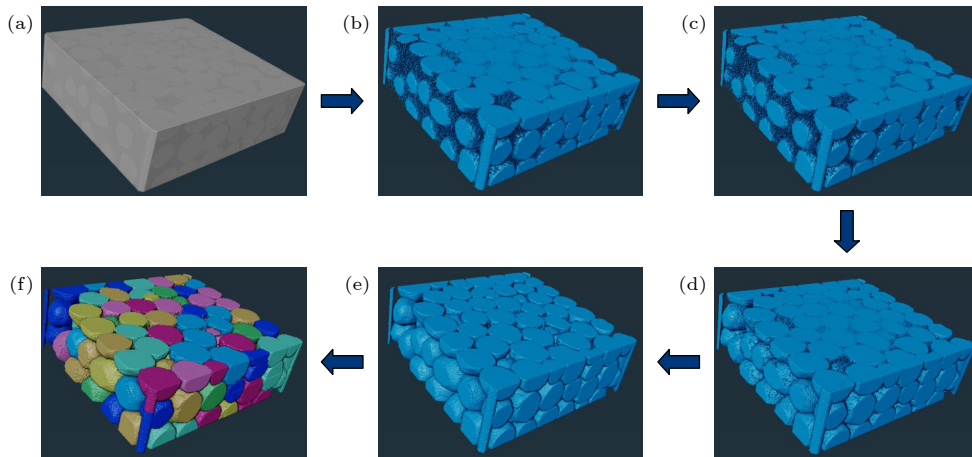


图 5 TATB 造型粉颗粒体系的图像处理 (3D) (a) 感兴趣区域; (b) 交互式阈值分割; (c) 孔隙填充; (d) 移除噪点; (e) 中值滤波及双边滤波; (f) 目标分离

Fig. 5. Image processing of TATB particle system (3D): (a) ROI; (b) interactive thresholding; (c) fill holes; (d) remove small spots; (e) median filter and bilateral filter; (f) separate object.

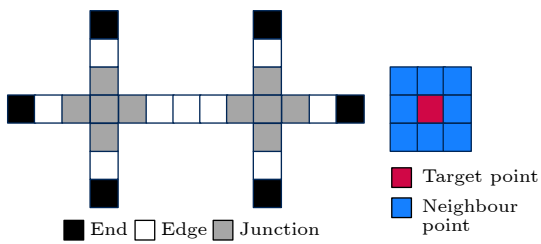


图 6 标记规则 (标记后的骨架及相邻点)

Fig. 6. Rule of labeling (marked skeleton and neighbour point).

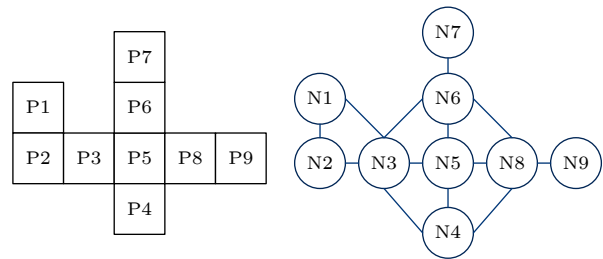


图 7 骨架与图的关联

Fig. 7. Relationship between skeleton and graph.

通过对 CT 数据、算法、图像进行处理, 本文以“孔隙”代表“颗粒”, 以“孔喉”代表颗粒的接触连接, 建立了 TATB 造型粉颗粒体系的孔隙网络模型, 将近球形的非规则颗粒等效为标准球体, 获得了力载过程的 TATB 造型粉颗粒的中心空间位置坐标、等效半径、颗粒体积、接触面积、接触数、颗粒标签等颗粒学关键特征参量, 如图 8 所示. 该模型的构建可实现 TATB 造型粉颗粒体系在力载作用下的三维、定量、原位、过程在线的精确表征.

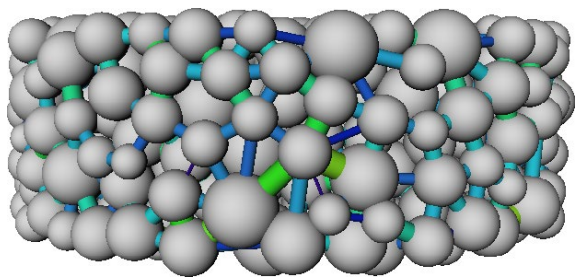


图 8 TATB 造型粉颗粒体系孔隙网络模型
Fig. 8. The PNM of TATB particle system.

4 结果与分析

4.1 全载荷作用下 TATB 造型粉颗粒体系演化

压制过程中, 当加载压力达到 60 MPa 时, TATB 造型粉颗粒体系将由颗粒状态变为结块的 PBX 胚体状态, 因此本文设计 0—60 MPa 为颗粒体系的全载荷阶段. 在该阶段加载过程中, TATB 造型粉颗粒体系在颗粒运动、空间变化、位置坐标、孔隙、形貌等各个方面呈现出复杂的变化. 图 9 和图 10 展示了 TATB 造型粉颗粒在 Z , X 方向上的演化规律. 任意选取 Z 和 X 方向某一切片发现,

0—3 MPa 阶段, 颗粒呈现出明显的宏观运动为主的特征. 在 Z 方向上颗粒空间坐标上移显著, 切片视场显示颗粒由 24 个变化为 25 个, 且 3 MPa 后无变化, 颗粒进入点为该视场边缘处 (图 9 红圈位置), 表明颗粒之间的宏观运动发生在低力载阶段, 高力载阶段颗粒的宏观运动较少. X 方向上, 在边界条件的限制下, 颗粒的竖向运动导致 X 方向颗粒数显著增加. X 方向切片视场显示颗粒由 26 个迅速变化为 32 个, 3 MPa 以后变化较少, 表明该阶段颗粒具有宏观运动、空间坐标位置变化显著的特征. 3—10 MPa 阶段内, 整个颗粒体系呈现出以内部变形为主的特征. 在该阶段, 颗粒体系宏观运动显著减少, 颗粒外部出现二次排布 (重排)、转动、填空等特点, 颗粒内部的孔隙迅速坍塌, 孔隙率急剧变小 (图 9 蓝圈). 10—60 MPa 阶段内, 颗粒体系呈现出压实特征, 60 MPa 时, 整个颗粒体系已致密且填满整个加载腔. 在该阶段, 颗粒在 Z 和 X 方向空间位置坐标基本固定, 无显著变化, 颗粒在高力载作用下压制密实, 内外部孔隙几乎为 0 (图 9 黄圈). 另外, 在颗粒形貌演化方面, 整个压制阶段, 大部分颗粒的形貌由近球体转变为椭球体, 且大部分椭球体的长轴发生在 X 和 Y 方向, 短轴发生在 Z 方向. 同时, 有少部分不规则形体的发生, 如颗粒形貌由近球形变成碗形 (图 9 绿圈).

4.2 低载荷作用下 TATB 造型粉颗粒体系演化特征参量定量分析

从 0—60 MPa 全载荷加载下可看出, TATB 造型粉颗粒体系发生力学行为最复杂的阶段在低载荷阶段, 该阶段颗粒运动特征、变形特征明显; 而高载荷阶段, 颗粒空间坐标位置基本固定, 颗粒

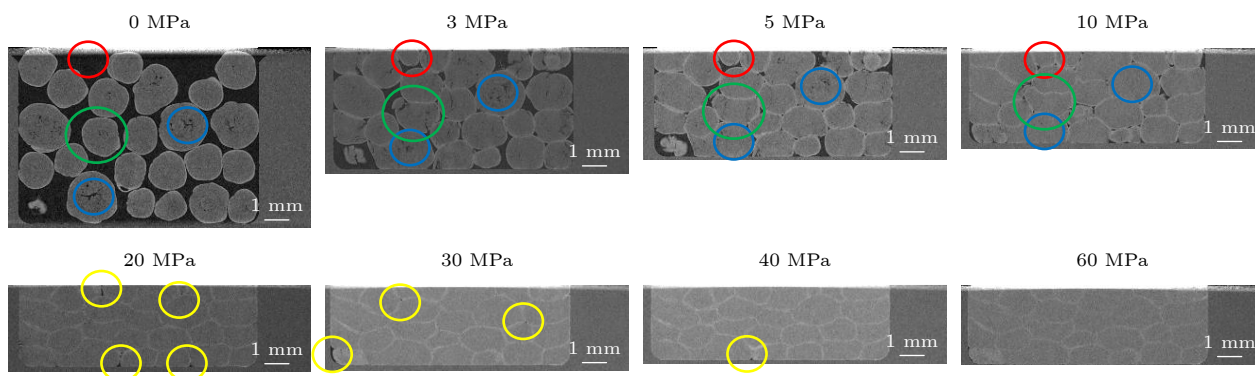


图 9 Z 方向 TATB 造型粉颗粒体系的演化
Fig. 9. Evolution of TATB particle system in Z direction.

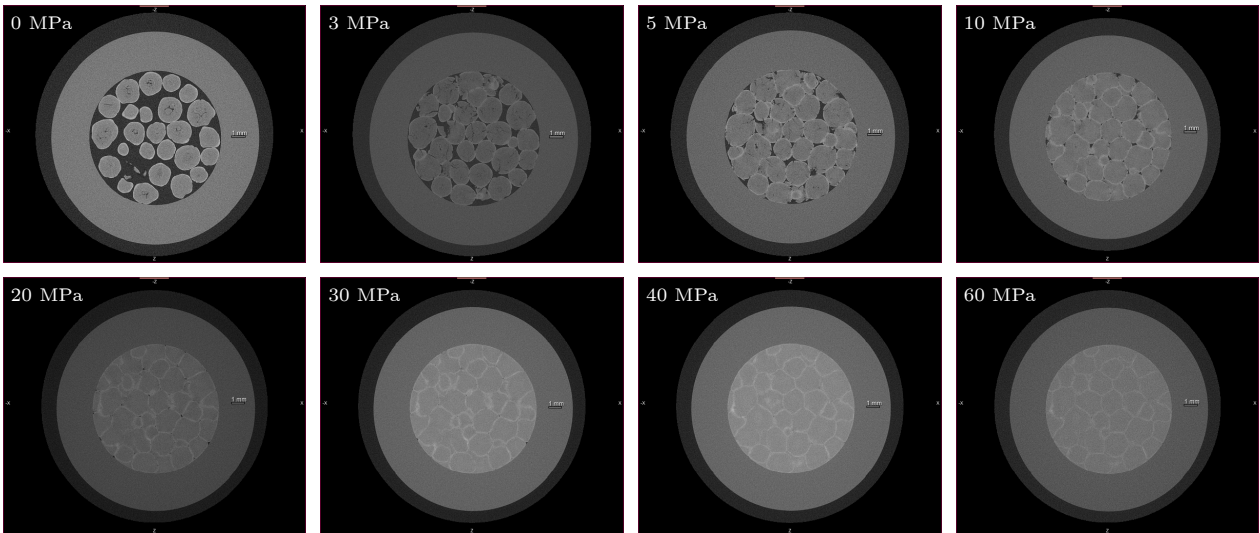


图 10 X 方向 TATB 造型粉颗粒体系的演化

Fig. 10. Evolution of TATB particle system in X direction.

体系在黏结剂和高应力作用下逐渐结块形成 PBX 胚体. 为进一步研究低载荷阶段的特征, 本文针对低载荷 (0—5 MPa) 作用下 TATB 造型粉颗粒体系进行了定量研究, 以每 1 MPa 作为间隔获得了颗粒体系关键特征参量演化规律.

4.2.1 颗粒接触数量变化定量分析

如图 11 所示, 随着压力的增加, 0—5 MPa 下, TATB 造型粉颗粒体系的接触数量随着压制力增大而变少, 总减少率为 53.3%. 总平均接触数量为 497, 其中 2—3 MPa 下平均接触数量与总平均值接近.

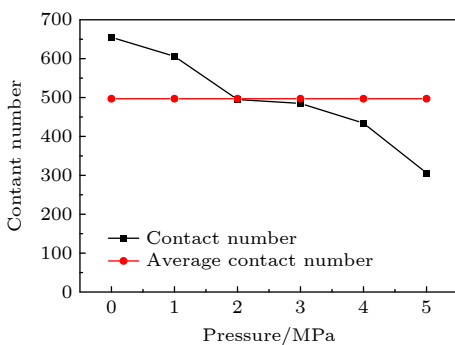


图 11 颗粒体系接触数量变化

Fig. 11. Change of particle system contact number.

从图 11 可看出, TATB 造型粉颗粒体系的整个演化过程呈现出致密、重排、压实 3 个阶段. 0—2 MPa 内属于致密阶段, 该阶段内颗粒体系接触数量急剧减少, 相对 0 MPa 减少率为 24.4%. 这是由于初始条件下颗粒体系处于随机堆积状态, 仅受

到重力及加载腔的边界力, 颗粒间的空隙大. 随着压制力的增大, 颗粒以宏观外部运动为主, 颗粒间的空隙的减少导致整体体积缩小. 2—3 MPa 内属于重排阶段, 该阶段内, 颗粒体系接触数量变化平缓, 相对 0 MPa 减少率为 26.0%. 这是由于颗粒在外部空间基本压实的情况下, 开始发生自身形变, 宏观运动表现为颗粒旋转和自适应重排. 3—5 MPa 内属于压实阶段, 该阶段内, 颗粒接触数量再次急剧变少, 相对 0 MPa 减少率为 53.3%. 这是由于在这个阶段, 颗粒体系重排完成, 部分颗粒在高分子黏结剂的作用下已出现融合现象, 整体以压实为主、进一步变形为辅, 同时颗粒内部孔隙变少.

4.2.2 颗粒接触面积变化定量分析

图 12 展示了 0—5 MPa 下 TATB 造型粉颗粒体系的总接触面积随着压制力增大呈现出先减少、再增加、后急剧减少的规律. 整个演化过程虽然也分为 3 个阶段, 但接触面积展现出来的演化规律与接触数量演化规律在 1—2 MPa 阶段内略有不同. 0—1 MPa 阶段内, 颗粒体系总接触面积由 5892 mm² 减少到 5317 mm², 减少率为 9.8%; 1—3 MPa 阶段内, 颗粒体系总接触面积由 5317 mm² 增加到 5879 mm², 增加率为 10.6%; 3—5 MPa 阶段内, 接触面积由 5879 mm² 减少到 4038 mm², 减少率为 31.3%. 整个压制阶段总减少率为 31.5%, 接触面积演化的主要原因在于颗粒体系在不断加载过程中, 部分颗粒的融合现象导致原有颗粒外表面积演变为新的大颗粒内部面积, 因此总接触面积减少.

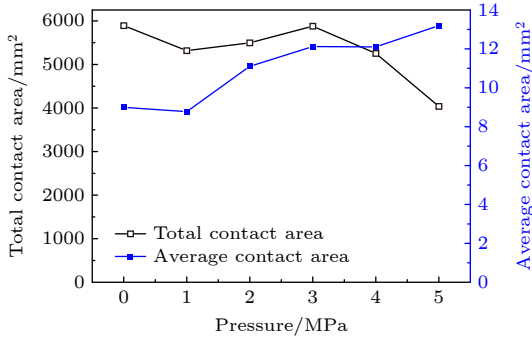


图 12 颗粒体系接触面积变化

Fig. 12. Change of particle system contact area.

单颗粒的平均接触面积计算式为

$$\langle S \rangle = \frac{S_T}{N}, \quad (1)$$

式中, $\langle S \rangle$ 是颗粒平均接触面积, S_T 是总接触面积, N 是当前压力条件下的颗粒接触数量.

随着压力的增大, 单颗粒的平均接触面积却呈现出持续增大的规律特点. 定量分析结果显示, 0—5 MPa 下, 随着压力的增加, 颗粒接触数量不断减少, 减少率为 53.3%, 大于总接触面积的减少率 31.5%, 使得单颗粒的平均接触面积反而增加, 平均接触面积总增加率为 46.7%.

4.2.3 颗粒强接触变化定量分析

力载作用下, TATB 造型粉颗粒体系中颗粒相互接触形成网络结构, 强接触是纵向载荷传递的主要途径, 起着力学骨架的作用; 弱接触是横向载荷传递的主要途径, 起着颗粒体系稳定性的作用. 强弱接触共同决定了整个颗粒体系的力学网络结构. 以平均颗粒接触面积作为强弱接触的判据, 当颗粒接触面积大于平均接触面积时判定为强接触, 小于平均接触面积时判定为弱接触. 强弱判据如下:

$$\text{强接触: } S_C > \langle S \rangle, \quad (2)$$

$$\text{弱接触: } S_C < \langle S \rangle. \quad (3)$$

式中, S_C 是颗粒接触面积, $\langle S \rangle$ 是平均接触面积.

0—5 MPa 强弱接触的演化规律如图 13 所示. 从图 13(a) 可看出, 随着压制过程的进行, 强弱接触数均持续减少. 其中, 强接触数基本呈现出减少的规律, 总减少率为 53.75%; 弱接触数呈现出持续减少的规律, 总减少率为 52.99%. 从强弱接触占比变化分析而言, 强接触占比范围在 35.35%—39.44% 之间, 平均占比为 37.74%. 图 13(b) 表明在外部线性加载过程中, 颗粒体系的强弱占比几乎维持不

变, 体现了外部稳定、线性、缓慢加载过程颗粒体系整体受力的稳定性, 没有出现颗粒体系突然坍塌的现象.

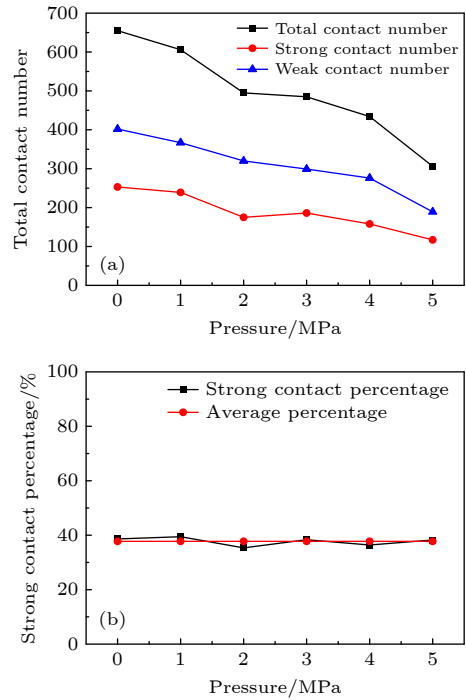


图 13 颗粒强弱接触变化 (a) 强弱接触数量变化; (b) 强弱接触占比变化

Fig. 13. Change of strong and weak particle contact: (a) Changes in the number of strong and weak contacts; (b) changes in the proportion of strong and weak contacts.

4.2.4 颗粒体积、等效半径变化定量分析

颗粒等效是指将一个不规则的颗粒体等效为一个标准的球体, 等效判据为等体积法. 等效直径是确定孔隙网络模型的重要参数之一, 与孔隙体积相同的球体直径为等效直径, 其计算式为

$$d = \sqrt[3]{6V_{3D}/\pi}, \quad (4)$$

式中, d 为等效直径 (mm), V_{3D} 为单个颗粒的体积 (mm^3).

如图 14 所示, 压制过程中 TATB 造型粉颗粒的平均体积与平均等效半径的演化规律高度吻合, 趋势一致. 演化特点同样分为 3 个阶段, 0—1 MPa 阶段内, 颗粒平均体积及平均等效半径略有下降, 下降率分别为 6.55% 和 2.39%; 1—4 MPa 阶段内, 颗粒平均体积及平均等效半径先快速上涨, 后缓慢增加, 增加率分别为 35.88% 和 9.03%; 4—5 MPa 阶段内, 颗粒平均体积及平均等效半径再次快速上涨, 增加率分别为 14.58% 和 4.62%. 整个压制过程

内颗粒平均体积变化率为 45.50%，颗粒平均等效半径变化率为 11.34%。这是由于在压制过程中，部分颗粒出现融合的特点，因此颗粒的体积会增加，但随着颗粒之间（外部）的运动及颗粒孔隙（内部）的坍塌，整个颗粒体系被压实，融合后的颗粒体积会小于原有 2 个颗粒体积之和。



图 14 颗粒体积、等效半径变化

Fig. 14. Change of particle volume and equal radius.

4.3 颗粒体系配位数变化定量分析

4.3.1 颗粒体系的配位数

颗粒体系中某颗粒的配位数定义为该颗粒与周围其他颗粒接触的总数目，如图 15 绿色目标颗粒所示，其物理意义表明了颗粒体系在压制过程中的压实程度。颗粒体系的平均配位数综合反映了颗粒物性（如颗粒表面摩擦系数、弹性模量和泊松比）、颗粒级配、颗粒体积份额等几何参数和物性参数对颗粒体系接触网络的影响，配位数越高，则颗粒体系越密实，反之则越松散。其定义为

$$\bar{N}_c = \frac{\sum_{i=1}^N N_{ci}}{N}, \quad (5)$$

式中， N_{ci} 为测量单元内第 i 个颗粒与周围颗粒的接触数， \bar{N}_c 为测量单元内颗粒的平均配位数。

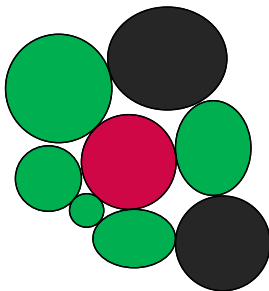


图 15 目标颗粒的配位数

Fig. 15. Coordination number of target particle.

本研究获得了 6 个不同连续加载状态下 TATB 造型粉颗粒体系的配位数演化规律，并从统计学形态、分布范围、数量、平均配位数、占比等几个方面进行定量分析。

4.3.2 TATB 造型粉颗粒体系配位数统计学分布

图 16 展示了 TATB 造型粉颗粒体系在 0—5 MPa 下配位数统计学形态分布典型特点。0 MPa 下，颗粒体系为仅处于重力和加载腔边界力作用下平衡体系，总颗粒接触数为 655 个。图 16(a) 展示了 655 个颗粒每个颗粒的配位数值，整个颗粒体系在 0 MPa 下的配位数分布范围为 2—13。图 16(b)—(f) 展示了 1—5 MPa 下，颗粒体系为处于重力、加载力和加载腔边界力共同作用下平衡体系，配位数的分布范围分别为 2—14, 2—22, 2—24, 2—22, 2—22。

随着压制过程的进行，TATB 造型粉颗粒体系不断被压实，颗粒体系平均配位数呈现出整体逐渐升高的规律。在 5 MPa 时，平均配位数稍有轻微下降，这表明了此时极少部分颗粒出现自适应调整，该阶段 TATB 造型粉颗粒体系整体已基本压制密实。

4.3.3 配位数演化形态分布、数量及占比定量分析

图 17 和图 18 所示为 TATB 造型粉颗粒体系在 0—5 MPa 下配位数演化规律，横坐标 Z 为配位数，纵坐标 N 为配位数个数，纵坐标 W 为配位数在各阶段的百分占比。压制过程各阶段配位数演化的具体特点为：0—5 MPa 下，占比最高的配位数分别为 8, 8, 9, 10, 9, 9(10)，对应的数量分别为 143, 128, 87, 74, 67, 46，其比例分别为 21.8%, 21.1%, 17.6%, 15.9%, 15.4%, 15.0%。定量分析结果表明，随着压力增加，呈现出最高配位数增加、但最高配位数占比逐渐下降的规律特点。3 MPa 时配位数形态分布为双峰分布，双峰值分别为 $Z = 8$ 和 $Z = 10$ ；4 MPa 时配位数形态分布为双峰分布，双峰值分别为 $Z = 9$ 和 $Z = 11$ ；5 MPa 时配位数形态呈现出双平峰分布，双峰值分别为 $Z = 9$ 和 $Z = 10$ 。在对 6 个状态占比前三的配位数进行定量分析，结果表明：0—5 MPa 下占比前三的总和分别为 57.6%, 54.0%, 47.5%, 43.9%, 42.6%, 42.8%。

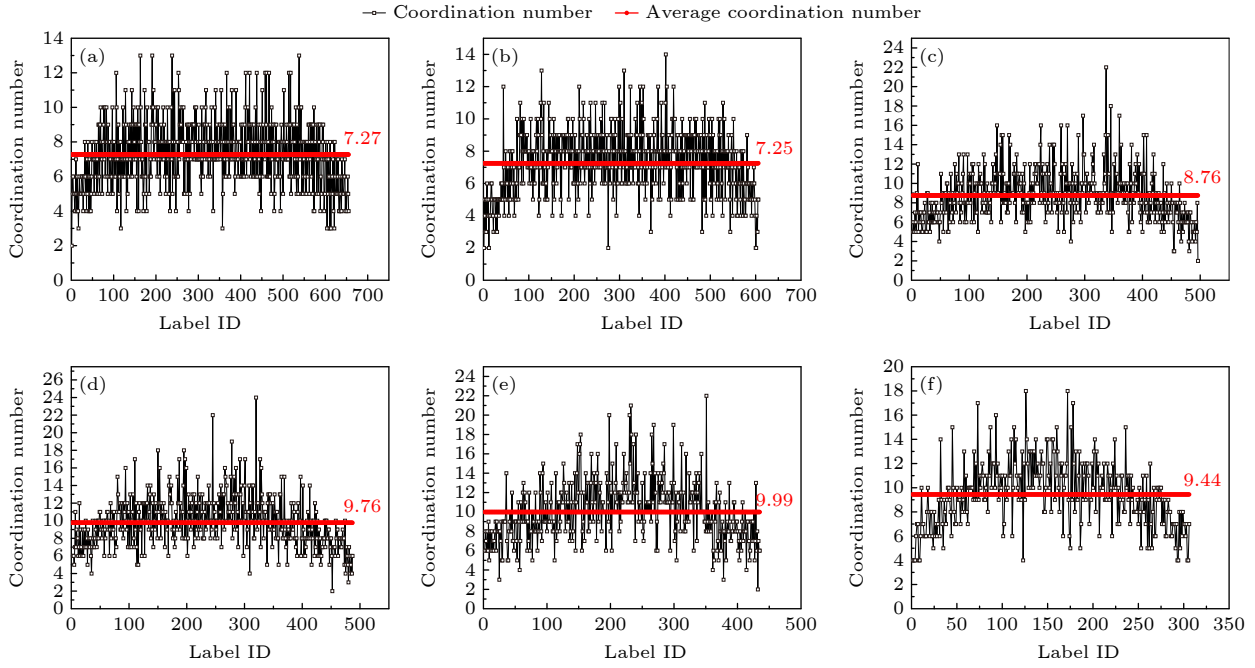


图 16 0—5 MPa 下颗粒体系配位数统计学分布 (a) 0 MPa; (b) 1 MPa; (c) 2 MPa; (d) 3 MPa; (e) 4 MPa; (f) 5 MPa
 Fig. 16. Statistical distribution of coordination number of particle system at 0—5 MPa: (a) 0 MPa; (b) 1 MPa; (c) 2 MPa; (d) 3 MPa; (e) 4 MPa; (f) 5 MPa.

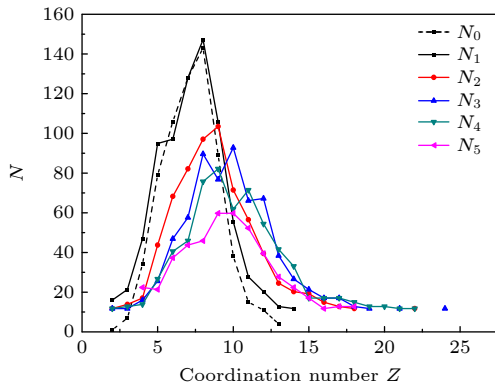


图 17 力载过程平均配位数数量分布演化
 Fig. 17. Evolution of mean coordination number distribution in loading process.

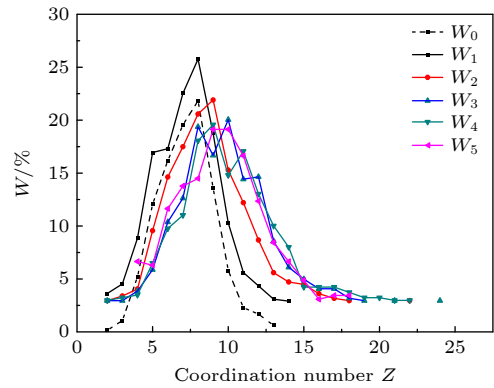


图 18 力载过程平均配位数百分比演化
 Fig. 18. Evolution of mean coordination percentage in loading process.

TATB 造型粉颗粒体系配位数 Z 的分布范围为 2—24, 其中, 82% 的配位数分布集中在 5—12 范围内; 配位数数量 N 分布范围为 1—143, 其中, 92% 的数量集中在 $N > 10$ 范围内. 在占比分析中, $Z = 6, 7, 8, 9, 10$ 的占比最大, 表现最稳定, 且随着载荷的线性增加, 占比 Z 也逐渐后移. 上升阶段 ($Z = 2$ —最大值) 累计占比持续在 2/3 以上, 该结果表明了 TATB 造型粉颗粒体系在外载荷线性、恒定压制过程中的受力的稳定性.

在统计学形态分布中, 配位数的分布基本呈现两端少、中间多的近正态分布规律, 随着压制过程

的进行, 中值峰向左移动, 均值峰向右移动, 其中, 在 3 MPa 和 4 MPa 下出现双峰值近正态分布, 5 MPa 下出现双峰近正态分布, 表明此时部分颗粒出现旋转和自适应重排, 与颗粒接触数量的趋势定量分析相吻合.

5 结论

本文采用高分辨 CT 结合原位同步力载技术对 TATB 造型粉颗粒体系开展了颗粒的接触与表征研究, 实现了颗粒体系力载过程的三维、定量、

原位、过程在线分析. 主要研究结论包括:

1) 建立了 TATB 造型粉颗粒体系的孔隙网络模型 (PNM). 将近球形的非规则颗粒等效为标准球体, 获得了颗粒压制过程的中心空间位置坐标、接触数量、接触面积、接触强弱、颗粒体积、等效半径、配位数等颗粒学关键特征参量.

2) 发展了一套针对 TATB 造型粉颗粒体系的图像处理方法. 针对获得的 CT 图像质量差、信噪比低、图像分割出现过分割和欠分割等问题, 采用二次中值滤波、双边滤波、阈值分割、分水岭算法等方法, 解决了颗粒与颗粒之间噪点、颗粒内部噪点、颗粒边缘不清晰等问题, 获得了高质量的颗粒形态学 CT 图像.

3) 获得了力载作用下 TATB 造型粉颗粒体系的关键特征参量演化规律. 研究发现: 0—5 MPa 下, 随着压制的进行, TATB 造型粉颗粒出现融合现象导致颗粒接触数量减少, 如 5 MPa 时减少率为 53.3%; 总接触面积减少率为 31.5%; 颗粒体系的强弱接触变化几乎维持不变, 强接触平均占比为 37.74%; 颗粒体积平均增加率为 45.50%, 平均等效半径增加率为 11.34%. 对配位数的大小、数量、分布、统计学形态、占比等开展定量分析发现, 0—5 MPa 下, 随着压力的增加, TATB 造型粉颗粒体系中平均配位数逐渐增加, 由 7.27 增加到 9.44, 配位数为 6—10 占比最高.

参考文献

- [1] Dong H S, Zhou F F 1989 *Performance of High-energy Explosives and Related Substances* (Beijing: Science Press) pp20-32 (in Chinese) [董海山, 周芬芬 1989 高能炸药及相关物性能 (北京: 科学出版社) 第 20—32 页]
- [2] Fan H, He G S, Yang Z J, Nie F D, Chen P W 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 106201 (in Chinese) [范航, 何冠松, 杨志剑, 聂福德, 陈鹏万 2019 物理学报 **68** 106201]
- [3] Hamilton B W, Kroonblawd M P, Isiam M M, Strachan A 2019 *Journal of Physical Chemistry C* **123** 21969
- [4] Steele B A, Clarke S M, Kroonblawd M P, Kuo I F, Pagoria P F, Tkachev S N, Smith J S, Bastea S, Fried L E, Zaug J M, Stavrou E, Tschauner O 2019 *Appl. Phys. Lett.* **114** 191901
- [5] Hertz H 1882 *J. Reine Angew. Math.* **1882** 156
- [6] Chang C S, Liao C L 1990 *Int. J. Solids Structures.* **26** 437
- [7] Tordesillas A, Peters J F, Gardiner B S 2004 *Int. J. Numer. Anal. Met.* **28** 981
- [8] Andrade J E, Vlahinić I, Lim K W, Jerves A 2012 *Geotechn. Lett.* **2** 135
- [9] Coppersmith S N, Liu C H, Majumdar S, Narayan O, Witten T A 1996 *Phys. Rev. E* **53** 4673
- [10] Silva M D, Rajchenbach J 2000 *Nature* **406** 708
- [11] Andrade J E, Avila C F 2012 *Granul. Matter* **14** 51
- [12] Hurley R, Marteau E, Ravichandran G, Andrade J E 2014 *J. Mech. Phys. Solids* **63** 154
- [13] Zhai C P, Herbold E B, Hurley R C 2020 *PNAS* **117** 16234
- [14] Chen Q, Wang Q H, Zhao C, Zhang Q, Hou M Y 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 154502 (in Chinese) [陈琼, 王青花, 赵闯, 张祺, 厚美璞 2015 物理学报 **64** 154502]
- [15] Løvoll G, Måløy K J, Flekkøy E G 1999 *Phys. Rev. E* **60** 5872
- [16] Miao T D, Yi C H, Qi Y L, Mu Q S, Liu Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4713 (in Chinese) [苗天德, 宜晨虹, 齐艳丽, 慕青松, 刘源 2007 物理学报 **56** 4713]
- [17] Yang R W 2007 *M. S. Thesis* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [杨荣伟 2009 硕士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [18] Zhou J, Long S, Wang Q, Dinsmore A D 2006 *Science* **312** 1631
- [19] Sanfratello L, Fukushima E, Behringer R P 2009 *Granul. Matter* **11** 1
- [20] Xing Y, Zheng J, Li J D, Cao Y X, Pan W, Zhang J, Wang Y J 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 048002
- [21] Baur M, Claussen J, Gerth S, Kollmer J, Shreve T, Uhlmann N, Pöschel T 2019 *Powder Technol.* **356** 439
- [22] Nguyen C D, Benahmed N, Andò E, Sibille L, Philippe P 2019 *Acta Geotech.* **14** 749
- [23] Brisard S, Serdar M, Monteiro P J M 2020 *Cement Concrete Res.* **128** 105824
- [24] Ramesh S, Thyagaraj T 2022 *Geomech. Geophys. Geo.* **8** 11
- [25] Fonseca J, O'Sullivan C, Coop M R, Lee P D 2012 *Soils Found.* **52** 712
- [26] Ma Y X, Liu C, Wang H, Zhang C X, Chen H, Zhang W B 2020 *Chin. J. Energ. Mater.* **28** 960 (in Chinese) [马翔翔, 刘晨, 王慧, 张才鑫, 陈华, 张伟斌 2020 含能材料 **28** 960]
- [27] Dai B 2015 *M. S. Thesis* (Beijing: Graduate School of China Academy of Engineering Physics) (in Chinese) [戴斌 2015 硕士学位论文 (北京: 中国工程物理研究院研究生院)]
- [28] Koyuncu C F, Durmaz I, Cetin-Atalay R, Gunduz D C 2014 *22nd Signal Processing and Communications Applications Conference Trabzon, April 23-25, 2014* p1971
- [29] Mouelhi A, Sayadi M, Fnaiech F, Mrad K 2013 *Biomed. Signal Proces.* **8** 421
- [30] Li Z T, Liu D M, Cai Y D, Ranjith P G, Yao Y B 2017 *Fuel* **209** 43
- [31] Jing H L, Dan H C, Shan H Y, Liu X 2023 *Materials* **16** 7426
- [32] Harshini D R D G, Gamage R P, Kumari W G P 2024 *Gas Sci. Eng.* **125** 205280
- [33] Zakirov T R, Galeev A A, Korolev E A, Statsenko E O 2016 *Curr. Sci.* **110** 2142
- [34] Ren X Z, Linden J V D, Narsilio G 2019 *Geoscience* **33** 345 (in Chinese) [任显卓, Linden Joost van der, Narsilio G 2019 地球科学 **33** 345]
- [35] Yin S H, Chen X, Liu C, Wang L M, Yan R F 2020 *Chin. J. Eng.* **42** 972 (in Chinese) [尹升华, 陈勋, 刘超, 王雷鸣, 严荣富 2020 工程科学学报 **42** 972]

Mechanical behavior evolution of TATB particle system based on CT *in-situ* characterization under load*

TAO Jie¹⁾²⁾ LI Haining¹⁾ DAI Bin¹⁾ LAN Lingang¹⁾ GUO Fei¹⁾
ZHANG Weibin¹⁾ NIE Fude^{1)†}

1) (*Institute of Chemical Materials, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China*)

2) (*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100081, China*)

(Received 4 March 2025; revised manuscript received 23 May 2025)

Abstract

TATB is currently the safest explosive in terms of safety performance. Polymer bonded explosive (PBX) formed by pressing TATB particles has important applications in military. Under the action of stress, the evolution of TATB particle system determines the microstructure and overall quality of molding grain. The molding method of PBX is usually realized by molding technology. In the process of molding, the structural evolution and mechanical properties of TATB particle system are very complex under the action of loading, and the high discreteness, strong non-linearity and bonding characteristics are difficult to characterize.

In this study, a set of image processing technologies is developed for the TATB particle system by using X- μ CT tomography and synchronous *in-situ* force loading. The TATB particles are a special composite material with multiple components, irregularities, multiple particle sizes, heterogeneity, and viscoelasticity. High-quality CT images of TATB particles under force loading are obtained. A three-dimensional pore network model (PNM) of the TATB particle system is established by CT image processing and analysis. Based on the model, the evolution characteristics of key parameters such as contact number, contact area, contact strength and coordination number are obtained.

The results indicate the evolutionary characteristics below. At 0–5 MPa, with the press proceeding, the stress of TATB particle system increases continuously, and the number of particle contacts in the particle system decreases, with a reduction rate of 53.3%. The total contact area decreases by 31.5%, but the average contact area of a single particle continues to increase; The strong contact and weak contact of the entire particle system show a decreasing trend, but the ratio of strong contact to weak contact remains almost unchanged, reflecting the stability characteristics of the TATB molding particle system in the external stable, linear, and slow loading process, and the average proportion of strong contact is 37.74%. The average increase rate of particle volume is 45.50%, and the curve of equivalent radius is very consistent with the curve of average particle volume. The average coordination number of the entire particle system increases from 7.27 to 9.44, and the highest coordination number is in a range of 6–10. The morphological distribution shows the characteristics of approximately normal distribution, double-peak nearly normal distribution, and flat-peak nearly normal distribution. At 5 MPa, some particles show the characteristics of rotation and adaptive rearrangement, which are consistent with the quantitative analysis of the trend of particle contact number.

This study reveals the movement, deformation and fusion rules of particles in the initial stage of the forming process, achieving the three-dimensional, quantitative and *in-situ* analysis of the force loading process of the particle system. These results are of important scientific and engineering significance for understanding the mechanical characteristics of the explosive particle pressing process.

Keywords: TATB, three-dimensional particle system, CT image processing, mechanical behavior

PACS: 45.70.-n, 83.80.Fg, 75.50.Tt, 07.05.Pj

DOI: [10.7498/aps.74.20250272](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250272)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250272](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250272)

* Project supported by the Science Foundation of Institute of Chemical Materials of China Academy of Engineering Physics (Grant No. SXK-2022-15).

† Corresponding author. E-mail: niefude@caep.cn

力载作用下基于CT原位表征的TATB造型粉颗粒体系力学行为演化研究

陶杰 李海宁 戴斌 蓝林钢 郭菲 张伟斌 聂福德

Mechanical behavior evolution of TATB particle system based on CT *in-situ* characterization under load

TAO Jie LI Haining DAI Bin LAN Lingang GUO Fei ZHANG Weibin NIE Fude

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 154501 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250272

CSTR: 32037.14.aps.74.20250272

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250272>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

孪晶界对 $\text{Cr}_{26}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{14}$ 高熵合金力学行为影响的分子动力学模拟

Effect of twin boundary on mechanical behavior of $\text{Cr}_{26}\text{Mn}_{20}\text{Fe}_{20}\text{Co}_{20}\text{Ni}_{14}$ high-entropy alloy by molecular dynamics simulation

物理学报. 2021, 70(18): 186201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210324>

基于micro-CT实验的颗粒体系接触力计算及演化分析

Contact force calculation and evolution analysis of granular systems based on micro-CT experiment

物理学报. 2025, 74(1): 014501 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241206>

尘埃等离子体棘轮中颗粒分离的三维模拟

Three-dimensional numerical simulation of particle separation using a dusty plasma ratchet

物理学报. 2024, 73(11): 115201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240319>

大密度比气泡在多孔介质通道内上升行为的三维介观数值模拟

Three-dimensional mesoscopic numerical simulation of the rising behavior of bubbles with large density ratio in porous media channels

物理学报. 2025, 74(5): 054701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241678>

基于蒙特卡罗原理的混合颗粒三相体系声衰减计算模型研究

Ultrasonic attenuation model of mixed particle three-phase system based on Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(7): 074303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211869>

基于量子随机行走和多维混沌的三维图像加密算法

Three dimensional image encryption algorithm based on quantum random walk and multidimensional chaos

物理学报. 2022, 71(17): 170303 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220466>