

颗粒聚合体碰撞破损的细观力学仿真研究

刘连峰[†]

中国地质大学工程技术学院, 北京 100083

摘要 粉末和颗粒材料常常以聚合体 (agglomerate, 还可译成结块, 聚团等) 的形式存在。无论是自然环境中还是工业处理过程中, 微小颗粒聚合体碰撞破损是一常见物理现象。近十几年来, 对颗粒聚合体碰撞研究在试验和数值模拟方面均取得了很大的进展。特别是利用颗粒离散元方法, 结合经典接触力学理论, 对微米颗粒聚合体碰撞破损的细观力学机理进行的研究, 取得了很多重要成果。基本形成了较为完善的模拟分析方法, 提出了许多新概念, 形成了目前适于分析研究的专用分析程序。本文介绍了目前国际上颗粒聚合体碰撞破损模拟研究的一般方法和理论, 总结了现有的主要研究内容及成果, 并提出一些研究展望。

关键词 颗粒聚合体, 离散元法, 碰撞破损, 散体, 细观力学

1 引言

粉末和颗粒材料常常以聚合体的形式存在。工业上(如制药、化工、食品、农业等)也经常生产此类产品以获取特有产品特性及使用性。这些产品在加工、包装及运输过程中产生互相碰撞或同容器碰撞而引起损坏或损伤, 从而使成品降级而造成资源浪费及经济损失。这一问题在工业处理中十分常见, 因此引起人们长期的重视和研究。理论上很早就有估算实际聚合体结合键“强度”及其分类的方法(如 Rumpf 的研究^[1])。颗粒聚合体碰撞强度的早期试验研究是采用自由落体试验 (drop test), 主要依据聚合体不出现明显破坏的降落高度来定义其强度。经过人们长期的努力, 在固体及颗粒聚合体的碰撞破损试验方面的研究取得了很多成果, 主要体现在利用新研制的各种加载或是高速冲射仪器来研究聚合体的破损机理及各种影响因素, 涉及的材料也多种多样。比如, Arbiter 等^[2]、Shipway 和 Hutchings^[3]、Gentzler 等^[4]对脆性球破碎的试验研究, Salman 等^[5~7]对固体球的直碰和斜碰破损的试验研究, Adams 等^[8]、Samimi 等^[9,10]、Schubert 等^[11]对颗粒聚合体破损的试验研究, 以及 Fu 等^[12]对湿颗粒聚合体的试验等等。也有利用非球状固体进

行碰撞破损的研究, 如 Cleaver 等^[13]利用单一水合晶体, 而 Yuregir 等^[14]利用方形氯化钠颗粒体。Cleaver 等^[13]发现不同碰撞方位会产生非常不同的裂隙扩展及碎片。总体来说试验的一致发现是: 固体或颗粒聚合体的碰撞破损同所施加的动能(即碰撞速度)成正比。

尽管试验在颗粒聚合体碰撞破损研究中发挥了不可替代的作用, 但是, 由于聚合体本身往往由微米级颗粒组成, 同时其碰撞破坏过程十分短暂, 因而试验很难捕捉每一时刻固体破损过程信息, 往往只限于对碰撞后的散块 / 碎团块进行统计分析。与之相比, 计算机数值模拟不受时间短和尺度小的限制。在过去的十几年中, 固体和颗粒聚合体碰撞破损的数值细观力学仿真研究取得了飞速的发展, 并在固体碰撞破碎过程、损伤机理以及实践应用方面都取得了许多重要成果。比如, 在球固体碰撞裂隙扩展机理研究上, Potapov 和 Cambell^[15]利用二维多边形离散元法, 将多边形单元“粘连”成一个弹性圆形固体, 并进行碰撞模拟。“粘连”的结合边只能承受一定的拉应力从而可以断裂。这样, 他们可以将观察到的破坏形态同各种断裂机制作比较。在颗粒聚合体碰撞破损机理研究上, 其三维离散元仿真始于英国 ASTON 大学 Thornton 博士的颗粒动力学研究组 (granular dy-

收稿日期: 2005-09-26, 修回日期: 2006-06-19
[†] E-mail: lianfengliu@cugb.edu.cn

namics research group)^[16~22]. 该研究组后迁入英国伯明翰大学土木工程系. 他们的研究旨在解释微米级颗粒聚合体在各种动态加载条件下的断裂和破碎机理, 研究的时间尺度往往着眼于碰撞瞬时, 得到了许多试验无法得到的细观成果. 他们的研究也为一些跨国公司如联合利华 (Unilever) 所资助和采用. 英国 Surrey 大学的研究人员 (现一部分迁入 Leeds 大学) 利用试验和仿真相结合的方法, 对颗粒聚合体的强度进行了类似的研究工作^[23~27]. 目前国际上其他研究组也取得了一些重要进展, 如 Kann 等^[28] 利用数值方法深入研究了破碎的整个过程. Mishra 等^[29] 近期对颗粒聚合体的质密度、接触密度以及撞击局部结构对其碰撞破损的影响进行了研究.

本文介绍目前国际上颗粒聚合体碰撞破损研究的一般方法和理论, 总结现有的主要研究内容及成果, 并提出一些研究展望. 重点在于总结数值仿真方面的研究成果.

2 颗粒聚合体碰撞研究的数值方法

2.1 颗粒离散单元法

对颗粒材料断裂的数值研究方法可采用分子动力学 (molecular dynamics) 方法. 如 Tsoungui 等^[30], Kann 和 Herrman^[28] 的工作. 然而, 在颗粒聚合体碰撞破损的细观力学研究中, 应用最为广泛的数值技术即是所谓的离散单元法 (discrete element method, DEM). 该技术最初由 Cundall 和 Strack^[31] 于 1979 年提出, 主要用于研究岩土力学问题. 自离散单元法产生以来, 其迅速发展并广泛应用于采矿、土木、建筑、机械、化工、制药、农业等行业中. 其中, 对颗粒介质微力学行为研究是离散单元法发挥其独有特色的一个重要领域. 离散单元法的创始人 Cundall 创立的美国 ITASCA 咨询集团公司在离散元方法方面做了不少开创性的工作, 最近他们推出的颗粒流程序 (particle flow code, PFC) 也可对颗粒物质进行研究, 该程序有二维和三维的. 国际上目前流行的适合颗粒聚合体碰撞仿真研究的计算程序之一是由 Thornton 研究组开发的 GRANULE, 该程序是原 Cundall 和 Strack 开发的 TRUBAL 的扩展版本. 它目前具有模拟弹性、摩擦、吸附性或非吸附性、接触点塑性变形或无塑性变形的球形颗粒作用的能力.

GRANULE 仿真视颗粒间的相互作用是一个动态过程. 利用有限差分方法计算颗粒间接触力增量和相应位移增量. 每一时步 t 到 $t+\Delta t$ 的一个计算循环中, 由增量形式的力 - 位移作用法则得出颗粒接触点

处的新的内部接触力, 继而得出每个颗粒的受力和力矩, 再通过对颗粒的加速度积分得到此刻颗粒的线速度和转动速度, 二次积分得到颗粒的位移增量. 计算循环如此往复下去.

离散元法于 20 世纪 80 年代由东北大学王泳嘉教授引入到中国, 目前在我国各个工程、教育和研究领域发挥着重要作用. 更为详细的有关离散单元法的理论可参见文献 [31~33], 有关颗粒离散元的近期进展可参见文献 [34,35].

2.2 接触本构关系

离散元法中, 颗粒被看作是相对自由运动的单元. 但当单元之间接触时即产生相互作用. GRANULE 中的颗粒接触本构关系主要基于颗粒接触力学的研究成果 (Johnson^[36,37]). 在颗粒聚合体碰撞模拟中, 颗粒往往被看作没有塑性变形而有摩擦, 且自动吸附的球形固体. 值得注意的是, 这里所着眼的颗粒, 其大小一般在微米 (1m 的百万分之一) 量级, 因此, 颗粒间往往存在很强的吸附作用. 另一方面, 当两个这样的球体相互作用时, 不单需要计算在接触点的法向接触力及吸附力 (有吸附性时), 还要计算由摩擦和吸附性 (有吸附性时) 产生的切向接触力. 对球形颗粒 1 和球形颗粒 2 之间的法向作用的力 - 位移关系, 如不考虑吸附性, 则应用 Hertzian 理论^[36]. 考虑一对有摩擦的弹性球 (颗粒 1 和颗粒 2), 设其弹性模量分别为 E_1 和 E_2 , 泊松比分别为 γ_1 和 γ_2 , 以及半径为 R_1 和 R_2 . 则接触点的法向力为

$$P = \frac{4}{3} E^* R^{*1/2} \alpha^{3/2} \quad (1)$$

其中, α 叫做相对趋近 (relative approach), 由两个球接触半径 a 决定, 即

$$a = \sqrt{\alpha R^*} \quad (2)$$

其中

$$\frac{1}{E^*} = [(1 - \gamma_1)/E_1] + [(1 - \gamma_2)/E_2]$$

和

$$\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$$

上述无黏性的条件下, 切向接触是非线性的. 切向力的计算遵循 Mindlin 和 Deresiewicz 理论^[38] (方法见文献 [39]).

颗粒聚合体碰撞模拟是视颗粒具有自动吸附 (autoadhesive) 的吸力. 在颗粒具有吸附性时, 需要计算颗粒之间吸附力和变形力的耦合. GRANULE 中主要基于 Johnson、Kendall 和 Robert 提出的模型 (即所谓的 JKR 理论^[37]) 来计算. 首先, 对于颗

粒接触的法向接触力，在自动吸附条件下，接触点的接触半径为

$$a = \left(\frac{3R^*P'}{4E^*} \right)^{1/3} \quad (3)$$

这里 P' 是等效 Hertzian 力，即产生同等大小接触面积的等效力，它由如下关系给出

$$P' = P + 2P_c \pm \sqrt{4PP_c + 4P_c^2} \quad (4)$$

这里 P 是施加力， P_c 是“分离力”(pull-off force). 据 JKR 理论

$$P_c = 3\pi\gamma R^* \quad (5)$$

这里 γ 是固体颗粒的表面能，用以定义吸附力的强度. 两个球体的相对趋近同接触半径 a 的关系为

$$\alpha = \frac{a^2}{R^*} - \sqrt{\frac{4\pi\gamma a}{E^*}} \quad (6)$$

因此，法向接触力增量 ΔF 同相对分离增量 $\Delta\alpha$ 之间的关系是

$$\Delta F = 2E^*a \left[\frac{3\sqrt{P} - 3\sqrt{P_c}}{3\sqrt{P} - \sqrt{P_c}} \right] \Delta\alpha \quad (7)$$

在吸附条件下，切向接触力的计算采用了组合模型即 Savkoor 和 Briggs 1977 理论^[40] 以及 Mindlin 和 Deresiewicz 1953 的理论^[38]. 更详细的介绍可进一步参见 Thornton 和 Ning (1998)^[41], Thornton 和 Yin (1991)^[42] 以及 Thornton (1991)^[43]. GRANULE 中也引入了颗粒间接触的塑性变形理论，可参见文献 [41,44].

3 颗粒聚合体碰撞模拟方法

3.1 颗粒聚合体的“制备”

“制备”一个颗粒聚合体需要耗费很多的计算机资源和机时. 下面是制备一个典型方形颗粒聚合体的过程. 值得注意的是，这里产生的颗粒聚合体是由微米级颗粒组成的微小聚团.

组份颗粒的特性是：弹性模量为 70GPa, 泊松比为 0.03, 密度为 $2.56 \times 10^3 \text{ kgm}^{-3}$ ，摩擦系数为 0.35, 表面能为 1.0 Jm^{-2} , 屈服强度 σ_y 为 $7.0 \times 10^{30} \text{ Pa}$ (此值确保无塑性变形产生). 这个方形颗粒聚合体由 10 000 颗粒组成，颗粒分为 5 个直径尺寸，分别是： $16\mu\text{m}$, $18\mu\text{m}$, $20\mu\text{m}$, $22\mu\text{m}$, $24\mu\text{m}$. 图 1 给出了颗粒尺寸分布及质量分布情况. 所撞击的目标板的力学特性同颗粒相同.

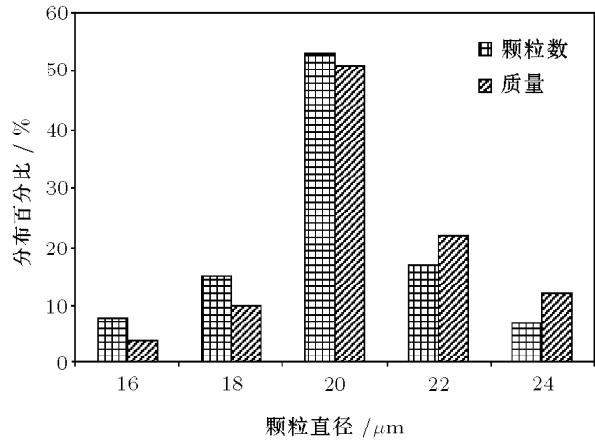


图 1 颗粒聚合体的颗粒尺寸及质量分布特性

在设定的一个三维立方空间里，随机产生 10 000 个颗粒，并使它们尽量靠近但禁止接触. 此时，颗粒间的摩擦先设置一个很小量 (此例中 $\mu=0.01$) 以保证近似光滑，同时设置阻尼常数为 80%. 此时对颗粒系统施加一个方向指向系统形心的重力场 (centripetal gravity field) $g=1.0 \text{ ms}^{-1}$ ，并选择时间步长为 $\Delta t=8.52 \text{ ns}$ 将颗粒集聚，运行 40 000 次. 此后，将上述向心重力场加大到 $g=10 \text{ ms}^{-2}$ ，然后继续运行程序，并时刻检测系统的空隙度、系统内部接触数以及应力水平. 随着颗粒系统密化，空隙度逐渐下降，接触数增加. 大约运行 100 万次后，上述参数变化会十分显著，此时，时间步长减小 10 倍以确保系统运行的稳定性，以每运行 10 000 次增加颗粒摩擦系数 0.02，直到达到 $\mu=0.35$. 在增加颗粒摩擦的同时，逐步增加颗粒间的表面能，最初可每运行一定量周期增加 0.01，到后期，可增加 0.05，直到颗粒间表面能达到 1.0 Jm^{-2} . 最后，将所施加的向心重力场慢慢降低到零，颗粒间的阻尼降至 5%. 最后，一个可以用于碰撞研究的颗粒聚合体就准备完毕，见图 2，其特性见表 1.

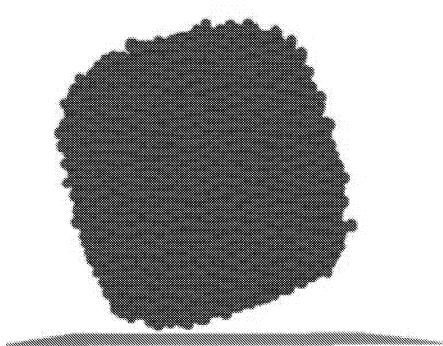


图 2 “制备”的立方体形颗粒聚合体

表 1 立方体颗粒聚合体特性

表面能 Γ (Jm^{-2})	1.0
空隙度	0.412
密度 (kg/m^3)	1 557.2
配位数 (co-ordination number)	4.557 5
内部应力 $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{13}$ (Pa)	-7.77, -10.52, -22.90

3.2 颗粒聚合体同平板的撞击

为模拟颗粒聚合体碰撞,往往需要产生一个平板或称边界壁。边界壁的力学性能如弹性模量、摩擦系数及泊松比一般同颗粒相同。而且,碰撞中其没有塑性变形。显然,边界壁的力学特性可以与颗粒不同。碰撞模拟开始时,将整个颗粒聚合体赋予一定的速度及冲击方向,颗粒聚合体即同平板发生撞击而出现某种程度的损伤或是碎裂。图 3 即为典型颗粒聚合体撞击平板的结果。碰撞结果可以利用计算机图形处理来显示颗粒聚合体的破碎情况。除此之外,可以利用计算程序获得颗粒系统的速度场、位移场、接触力在颗粒系统的传播情况、统计已断开的连接键、系统的或子颗粒系统的动能以及平板所承受的冲击力等信息。

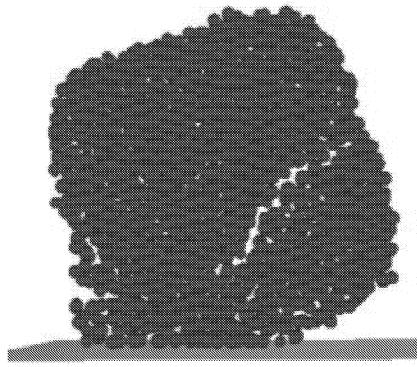


图 3 典型颗粒聚合体撞击平板

4 颗粒聚合体碰撞的一些研究成果

到目前为止,利用数值方法研究固体和颗粒聚合体碰撞破损的机理取得了很多重要成果,使人们对这一常见物理现象有了许多深刻的认识。

4.1 颗粒聚合体碰撞的细观机理及破损能程度分类

在颗粒聚合体碰撞中,程序可以获得大量数据。为考查颗粒聚合体碰撞特点,在模拟中经常检测 3 个重要参数,即损伤率 (damage ratio)、被撞击板所受

的力 (wall force) 以及颗粒系统的归一化总动能 (normalised kinetic energy)。图 4 是一个典型球形颗粒聚合体撞击平板时所获得的上述 3 个参量的变化 (参见文 [29], 颗粒系统撞击速度为 1 m/s, 颗粒间表面能为 1.0 Jm^{-2})。

颗粒聚合体的损伤率定义为碰撞中断裂的结合键总数 N_b 同初始颗粒间完好结合键总数 N_0 之比。记为

$$D = N_b / N_0 \quad (8)$$

该参数可以定量的反应颗粒聚合体受撞击时内部受损的情况。其次,颗粒聚合体与板相撞时板所受的力可由颗粒同板的相互作用计算统计得出,该参数可以有效地判定颗粒聚合体的加载和卸载过程。最后,系统撞击前后的动能可以由每个颗粒的动能累加统计得出。

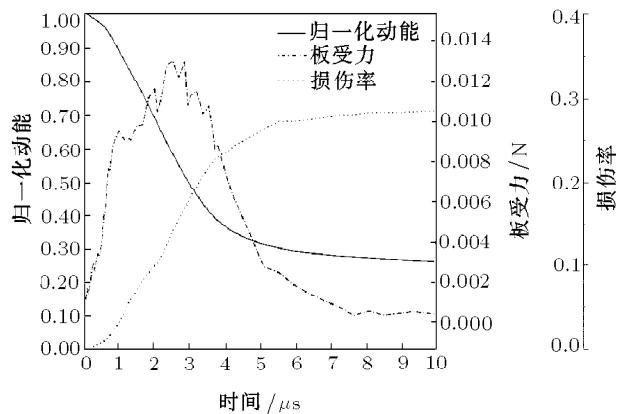


图 4 一个典型球形颗粒聚合体撞击平板所得到的参数变化 [29]

通过大量碰撞模拟发现:颗粒聚合体内部损伤往往分为二个阶段(如图 4 所示)。一是在碰撞初始期会在聚合体受力面形成一个“损伤域”(damage zone),并由外向内传播。这个域内的机理十分复杂,往往类似于颗粒介质塑性变形:颗粒聚合体同板的接触部位微结构产生“不可逆”变形,颗粒间出现滑动,内部结构重组,以及随机分布的微裂隙产生并沿经线方向分布。这一阶段导致大量结合键的断裂。此过程系统

的损伤率迅速增加，系统的总动能不断下降直至最低点，同时板所受的力迅速升高并达到一个相对稳定峰值区域。因而，此过程可以认为是颗粒聚合体碰撞的“加载”过程。第2阶段是颗粒聚合体进行有选择的破坏过程，即上述一些微裂隙沿经线方向继续发展，并从“损伤域”传播开来形成裂纹，有些则重新闭合。颗粒系统的动能有所恢复，即颗粒聚合体有可能出现反弹现象（在有些碰撞中，系统也可能没有明显的动能恢复）。板所受撞击力逐渐下降。这一过程可视为撞击的“卸载”过程。这一过程中，系统的损伤率继续少量增加，其增加的速率明显比以前减低。表明颗粒聚合体内部的结合键断裂程度基本完成。

目前的研究中，为正确理解颗粒聚合体碰撞后的破损破裂程度，提出了一些新的概念。“裂断”模式（fracture）（图5）是指碰撞引起颗粒聚合体破坏形态中有明显的裂隙面（或断开面），聚合体往往断为两个或多个较大子颗粒团并伴有少量细小散颗粒。如果由于使用了非常大的撞击速度，而上述子颗粒团又破损为许多更细小群团（clusters），那么称后

者为“碎裂”（shattering）。另外一种破坏模式是颗粒聚合体碰撞后没有出现明显裂隙或裂缝，而是最终由一个位于中间上部的较大颗粒群团以及其余的小群团甚至是单独散颗粒组成，则称此类破坏为“解体”（disintegration），见图6。如果上述解体碰撞中所用的撞击速度足够大而导致没有任何一个较大群团生存，则称此模式为“完全解体”（total disintegration）。值得注意的是，尽管“完全解体”和“碎裂”在细小颗粒产生状况方面可能相似，但区别在于系统碰撞末动能的差异。当“碎裂”产生时，大量子群团及散颗粒以较高速度反射，而当“完全解体”发生时，颗粒聚合体只是在撞击板上坍塌一个堆。有时，颗粒聚合体碰撞时，出现一种介于“裂断”和“解体”之间的破损模式，见图7，即颗粒聚合体由于受剪切作用而“削掉”一块，产生一个独立颗粒群团，则定义此类破坏模式为“削裂”（chipping）。对颗粒聚合体碰撞破损形态分类是比较困难的问题，有时颗粒聚合体破损处于上述各种形态之间。但上述概念对统一人们的认识有十分积极的意义。

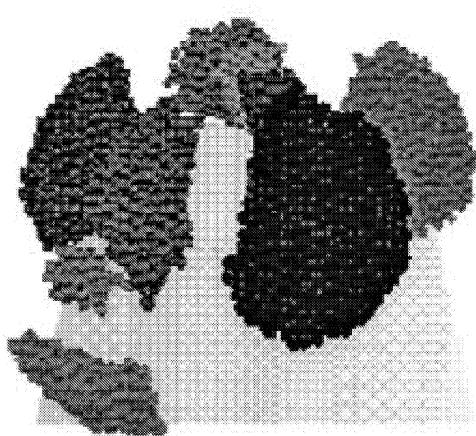


图5 颗粒聚合体碰撞“裂断”模式^[29]

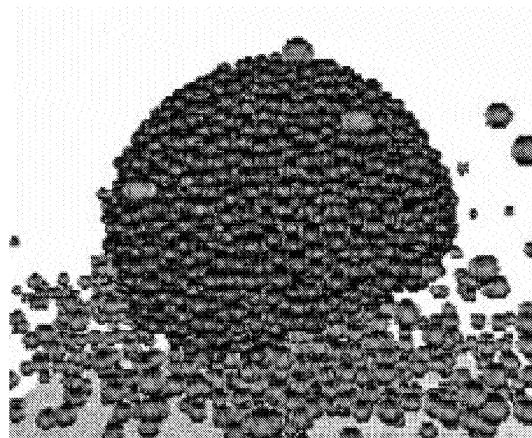


图6 颗粒聚合体碰撞“解体”模式^[29]

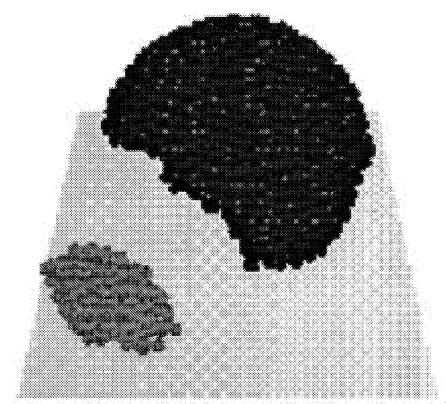


图7 颗粒聚合体碰撞“削裂”模式^[29]

对颗粒聚合体碰撞研究，除了考察上述损伤率、板所受撞击力、系统动能以及破坏模式外，还可以检验颗粒系统内部接触数的变化、内部接触力传播、速度场、位移场、应力应变等等。

4.2 颗粒聚合体碰撞破损的影响因素研究

4.2.1 速度、表面能

早期的颗粒聚合体碰撞破损伤研究由于受到计算器容量和速度的限制，往往限于二维模拟。如Thornton 和 Yin 等^[42]1996 年进行的二维碰撞研究，其生成的颗粒聚合体只有 1 000 个颗粒，

但解释了聚合体裂碎的许多力学机理，并取得了同试验很吻合的结果。其后的研究逐步开始对三维颗粒聚合体进行仿真，考察最为频繁的影响因素是碰撞速度和颗粒间的表面能。这方面的研究可参见文献 [17,20,21,24,25,41] 等。所有的颗粒聚合体碰撞研究均表明，系统损伤随碰撞速度的增加而加重。Kafui 等^[20]1993 年提出颗粒聚合体碰撞损伤与撞击速度的平方成比例，并提出颗粒聚合体的损伤率是韦伯常数 (Weber number) 的函数。韦伯常数为

$$We = \rho V^2 d / \Gamma \quad (9)$$

其中 ρ 是材料密度， V 是撞击速度， d 是颗粒大小尺寸， Γ 是表面能。韦伯常数表示输入动能同结合能之比。其后，为解释在速度很小时上述关系与模拟结果所产生的不符，Thornton 等^[17]进而提出一个速度下限 V_0 ，即小于该速度时，颗粒聚合体没有明显的损伤。Thornton 等提出一个修正的韦伯常数，即

$$We' = \rho(V - V_0)^2 d / \Gamma \quad (10)$$

上述关系可以很好的用于分析颗粒聚合体的碰撞损伤率。Ghadiri 和 Papadopoulos^[45]利用试验证实存在一个损失倾向参数 η (attrition propensity parameter)，并与速度及表面能有如下关系

$$\eta \sim (\rho V^2 d / \Gamma) (\sigma_y / E) \quad (11)$$

σ_y 是屈服应力， E 是弹性模量。可以看出，式中的第一项即是韦伯常数。Thornton 等得出损伤率 D 由如下关系计算

$$D \sim \ln(V/V_0) \quad (12)$$

V_0 即上述提到过的下限速度，即小于该速度，颗粒聚合体没有明显的损伤。Thornton 认为 V_0 随表面能的指数增加。Kafui 等^[21]对晶格排列的颗粒聚合体的研究认为，下限速度应同表面能成幂次函数，即

$$V_0 \sim \Gamma^{3/2} \quad (13)$$

这就表明损伤率应该与 $\ln(V^2 / \Gamma^3)$ 成比例。无量纲分析表明损伤率是如下无量纲项的函数

$$\rho d^3 E^2 \left(\frac{V^2}{\Gamma^3} \right) = \frac{We^3}{C^2} = CA^3 \quad (14)$$

这里， $C = \rho V^2 / E$ 是柯西常数，表示惯性力同弹性的比。 $A = Ed / \Gamma$ 是弹性力同黏性吸力之比，或称之为弹性吸附指标。但是， p 、 d 和 E 是否是颗粒力学特性还是颗粒聚合体的名义属性，则需要进一步研究。

4.2.2 晶格排列、颗粒聚合体形状

Kafui 和 Thornton^[21]模拟了一个晶格规则排列的颗粒聚合体同一个目标板的撞击。颗粒生成时经过精心安排形成面心结构，如图 8。在碰撞之前调整颗粒聚合体的方位使存在多条竖直相接排列的颗粒串垂直平板。与平板的接触面形成一个钻石状面积，并

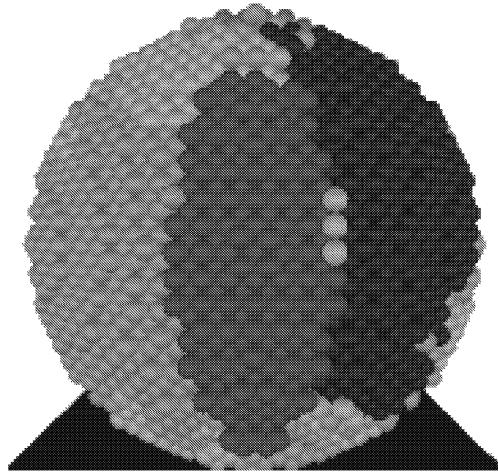
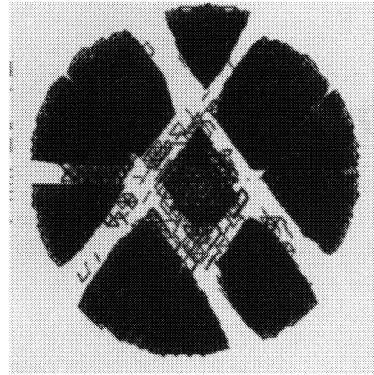


图 8 面心晶格排列颗粒聚合体^[21]

由 4 组密排的三角平面决定。由此，在颗粒聚合体撞击平板时，接触力只会通过在接触面之上的竖直颗粒串传播，从而引起这些颗粒的降速。而在相邻的密排平面、接触面垂直投影之外的以及其他各处的颗粒不会受到任何阻碍。由此，相邻的承载和未承载密排平面产生很强的非连续性。这会产生一个局部剪切变形，随着板力达到最大值导致相邻密排平面颗粒中 3 组接触的一组的断裂。随着动能降至最低点，结合键的断裂由板自下而上传播开来。然后，在卸载过程中，随着系统动能的恢复，在相邻承载和未承载密排平面之间的第 2 组接触断裂，并从颗粒聚合体的顶部自上而下传播。随着系统动能的进一步恢复，在第 3 组接触的一些结合键断裂，从而在碰撞结束前导致沿剪切引起的薄弱面裂断。研究表明，在颗粒聚合体降速过程中，一整套由于剪切而出现的薄弱面全部生成，并存在一个撞击速度，当达到此速度时，所有剪切薄弱面即会生成。低于该撞击速度时，颗粒聚合体产生的断裂面是上述薄弱面的子集，见图 9。高于此撞击速度时，并没有新的断裂面生成，只是残余颗粒群团会更粉碎，这是因为更多的内部结合键断裂以及高速下的“碎裂”(shattering) 结果。

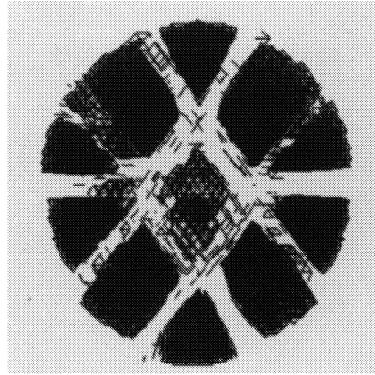
上述研究详细地解释了晶格排列的颗粒聚合体破坏的机理。在颗粒聚合体的形状研究方面，Thornton 和 Liu^[22]研究了立方体颗粒聚合体的碰撞行

为. Liu 和 Thornton [46] 还研究了圆柱体颗粒聚合体以及立方体聚合体的碰撞问题, 立方体颗粒聚合体同板的碰撞方位分为边碰撞、角碰撞和面碰, 圆柱聚合



撞击速度 = 3m/s

体同板的碰撞分为底边碰和面碰. 研究表明颗粒聚合体的破损能度同上述碰撞方位密切相关.



撞击速度 = 5m/s

图 9 面心晶格排列的颗粒聚合体碰撞破坏 [21]

4.2.3 质密度、接触密度、碰撞局部结构、碰撞角度

Mishra 和 Thornton [29] 考察了颗粒聚合体质密度、内部接触密度以及碰撞方位对颗粒聚合体破损能度的影响. 首先“制备”了 5000 颗粒的 4 种不同质密度的颗粒聚合体, 分别是 0.602, 0.583, 0.571, 0.537. 对应的内部接触数分别是 12 400, 8 329, 7 653 和 6 251. 研究发现: 高质密度的颗粒聚合体总是在碰撞速度达到一个极限速度后出现明显的“裂断”, 而低质密度的聚合体在同样的碰撞条件下出现“解体”. 而质密度介于二者之间的聚合体则可能“裂断”或是“解体”. 为研究颗粒聚合体内部接触数的影响, 他们又制备了一个质密度为 0.571 的颗粒聚合体, 但是其内部接触数为 8 270 个. 研究发现, 即使质密度相同, 在接触数不同的条件下, 碰撞的破损能度不尽相同. 接触数大者呈现“裂断”, 而小接触数的聚合体为“解体”模式. 上述研究结果蕴涵着接触数的变化改变了力在聚合体的传播路径, 从而改变了动能的分配方式. 该研究还考察了接触的局部结构变化对碰撞破损能度的影响, 即改变颗粒聚合体的碰撞的部位. 研究指出, 改变碰撞部位时聚合体碰撞破损能度可由“解体”过渡到“裂断”.

Moreno 等 [27] 研究了撞击角度对颗粒聚合体碰撞破损能度的影响. 研究产生了一个各向同性的球体颗粒聚合体, 并进行斜碰试验. 研究指出, 颗粒聚合体的损伤率只依赖碰撞速度的法向分量, 而切向速度对损伤率几乎没有影响.

4.3 湿颗粒聚合体碰撞团聚

为模拟潮湿颗粒系统, Lian 等 [47~49] 开发了一个能计算两个湿颗粒之间液桥力和黏力的近似模

型. 但是, 该模型只适于颗粒系统水饱和度较小的情况, 即颗粒间流动液体处于悬浊. 同时, 假定由于液相产生的力与固体作用产生的力不耦合. 由于分析法求解 Laplace-Young 方程的困难, 他们假定液桥形状为“环面形”(toroidal) 近似, 并利用乔治 (Gorge) 方法求解液桥力. 即毛细力为 F_c (capillary force)

$$F_c = 2\pi\gamma\rho_2(1 + H\rho_2) \quad (15)$$

这里 γ 是液气界面的表面张力; ρ_1 、 ρ_2 是液桥环面形近似的主半径; H 是液桥颈处的平均曲率, 由 ρ_1 , ρ_2 计算而得. 动态湿颗粒系统的法向黏力 (viscous forces) F_{v_n} 可由下列公式计算

$$F_{v_n} = 6\pi\eta R^* v_n \frac{R^*}{S} \quad (16)$$

这里, η 是液体的黏性; S 是两个球体的分离距离; v_n 是两个球颗粒的相对法向速度. 切线黏力 F_{v_t} 采用如下渐进分析法

$$F_{v_t} = \left(\frac{8}{15} \ln \frac{R^*}{S} + 0.9588 \right) 6\pi\eta R^* v_t \quad (17)$$

这里 v_t 是相对切线速度; $\frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}$.

将上述接触关系迭加到原有颗粒接触的本构关系 (有粘着吸附或无粘着吸附) 上, Lian 等 [47] 模拟了两个湿颗粒聚合体的碰撞再聚团 (coalescence) 问题, 图 10. 每个颗粒聚合体包含 1000 个球体, 球体之间存在液相, 对碰中两个颗粒聚合体由于液桥力及液体黏力的作用出现粘合及再聚团现象, 系统能量主要由液体的黏性阻碍以及颗粒间摩擦而耗散, 而不是液桥键的断裂 (只耗损大约 5% 的能量). 再结团的颗粒

聚合物的结构为高度无序并由撞击速度决定, 当速度趋向零时, 两个颗粒聚合体只是像两个固体一样粘在一起; 当速度增加时, 再结团的合成聚合体的外切球(circumscribing sphere)尺寸减小, 并存在一个极限碰撞速度, 使再聚团颗粒聚合体的外切球达到最小;

当对撞速度高于此极限速度时, 合成聚合体的外切球的尺寸加大, 这是因为过分的“扁平”(flattening)所致。另一方面, 增加颗粒间液相黏性会导致黏性阻碍耗损的能量增加, 以及内部摩擦耗损的能量相对减少, 也导致上述极限速度的增加。

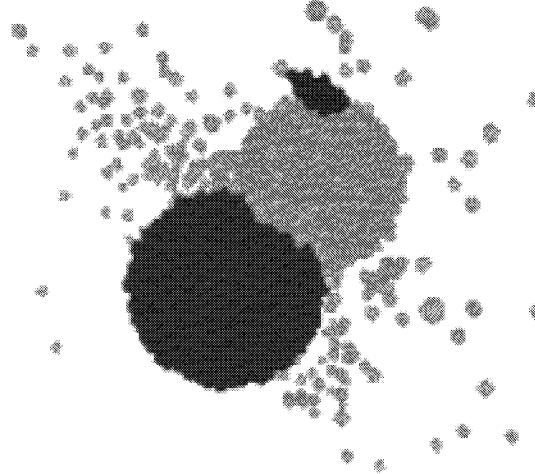


图 10 两个湿颗粒聚合体的碰撞粘连^[45]

Fu 等^[12]近期的湿颗粒团碰撞试验进一步证实, 绝大部分能量主要由颗粒接触面的液桥黏性流动所消耗(在他们的试验中, 大约 97%), 并认为碰撞模拟的一般趋势同试验结果吻合很好。尽管数值模拟还有许多因素没有加以考虑, 但已为工程实际提供了十分有价值的数据结果。

4.4 颗粒聚合体裂断机理

对颗粒聚合体碰撞断裂机理的研究一直是一个很重要的课题。当一个颗粒聚合体同目标板撞击时, 力即产生并从接触部位传入颗粒聚合体内部。显然, 力只能通过颗粒之间的接触传递, 因此, 其传递方式必然由聚合体微结构所决定, 即颗粒聚合体内部的接触数及接触位置。压密颗粒聚合体的一般特点是力的传播是不均匀分布的, 而是趋于沿某些独立的颗粒串传播, 并同受压的方向一致^[50,51]。从颗粒聚合体碰撞的过程图像上已经观察到, 只有在撞击部位邻近域生成了强力传播路径, 并传入系统时, 颗粒聚合体才会产生裂隙。而这些强力传播路径的生成能力取决于局部微结构和组成这些路径的颗粒的稳定性。质密系统由于颗粒间的较强约束, 从而容易形成这种强力传播路径。而松散颗粒聚合体内存在较少接触、颗粒约束少, 因而在力从板传播时, 这些颗粒更容易出现位移移动, 这就导致了撞击部位产生很大微结构的不可逆变形和强力衰减。因而, 即使提高颗粒结合键强度及提高撞击速度, 系统出现更多的是“解体”模式, 而非“裂断”^[19,29]。

然而, 上述机理并不能完全解释裂隙是如何产生的。我们近期(2004)对颗粒聚合体碰撞断裂的机理进行了深入研究^[22]。研究生成了一个立方颗粒聚合体(10 000 颗粒, 5 种颗粒尺寸 16~24 μm, 表面能 1.0 J m⁻²)。撞击前旋转颗粒聚合体使之用一个边撞击目标板, 并且板的法向矢量同连接聚合体质心和接触点的矢量的夹角为 30°。研究详细追踪了颗粒聚合体内部的力的传播(图 11)、速度场(图 12)以及裂断模式(图 13)。研究指出, 强力传播的效应是在颗粒聚合体内部引起不均一(heterogeneous)的速度场, 由此在速度不连续面产生了剪切弱区, 这些弱区既是裂隙面产生的选择区而发展成裂隙。如果由于某种原因, 强力无法传入颗粒聚合体, 则裂隙不会产生, 颗粒聚合体的破坏将出现渐进“解体”模式。显然, 进一步的研究需要考察表面能变化、速度变化以及结构变化对上述断裂机理的影响。

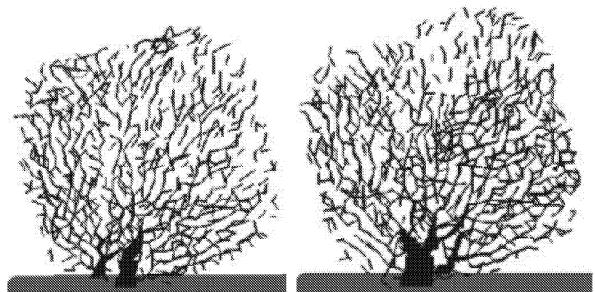


图 11 立方颗粒聚合体内部的力的传播

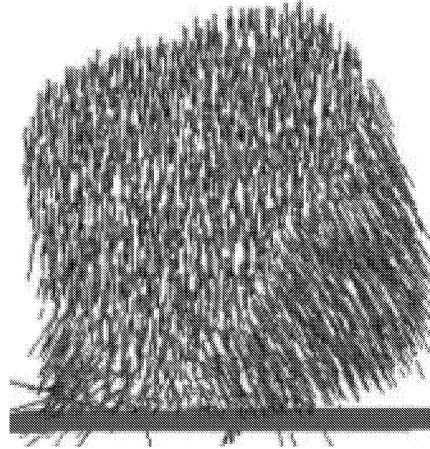


图 12 立方颗粒聚合体内部的速度场

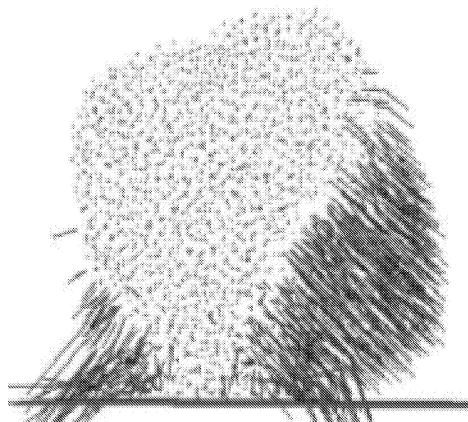


图 13 立方颗粒聚合体的断裂模式

4.5 碰撞后颗粒聚合体破坏的碎片统计分析

对碰撞产物的统计分析同许多实际粉体工业有密切联系。比如，这些统计数据有助于对聚合体做强度分析和分类，或用于预测和控制生产过程及产品特性。在工业试验中，往往采用筛选方法，把不同大小的破碎块进行分类。但数值模拟撞击的碎片、碎块统计困难在于如何计算才可以表征撞击后产生的颗粒碎块 (clusters) 的尺寸。一种选择是定义碎块尺寸 d_f 为其外切包容球的直径，并除以初试颗粒聚合体的外切包容球直径 d_z 来归一化。另一个方法是定义碎块的质量 m ，并除以原始颗粒聚合体的质量 M 。如图 14 所示，统计结果往往在双对数坐标下给出小颗粒碎块累加质量 (尺寸) 百分比 f 同归一化质量 m/M (尺寸) 的关系。统计分两个区域，即细小残余 (debris) 区域和生存的大块颗粒团 (residue) 区域。这样所获得的模拟结果可以同试验进行直接比较。

从图 14 中可以看出速度对最终生成物尺寸的影响，即速度越大，生成的细小颗粒越多。为考察碰后产生的碎块同颗粒聚合体结合能的关系，也往往考察不同结合能条件下小颗粒碎块累加质量 (尺寸) 百分比 f 同 $V^2(m/M)^n$ 的关系，如图 15。大量模拟研究表明，除很轻微的破损 (无裂隙) 或非常严重的破损外，碰后累加质量同 m/M 有如下关系

$$f \sim (m/M)^n \quad (18)$$

或者

$$f = \lambda V^2 s^n \quad (19)$$

其中， v 是碰撞速度， s 是归一化 m/M 或 d_f/d_z 的大小。 λ 是由材料性能决定的常数。指数 n 与碰撞速度无关，但随结合键强度增加而降低。这是因为，强度结合的颗粒聚合体往往产生整齐的裂隙以及在撞击域产生细小残余，因此， n 变小；而弱聚合体产生大的残余及非完善裂隙，导致 n 值增加。Kafui 等^[21]通过对晶格排列的颗粒聚合体的碰撞研究，定量的给出 n 和 λ 同表面能的关系为

$$n = 0.25 \Gamma^{-0.2} \quad (20)$$

$$\lambda = \Gamma^{-2} \quad (21)$$

但此研究十分初步，需要进一步的大量数据来得到更精确的关系。而对于碰撞后生存下来的大块颗粒团的统计，Kafui 等利用其归一化的质量同碰撞速度与表面能之比的关系进行量化研究，认为其符合幂函数关系（至少对于晶格排列的颗粒聚合体适用）。

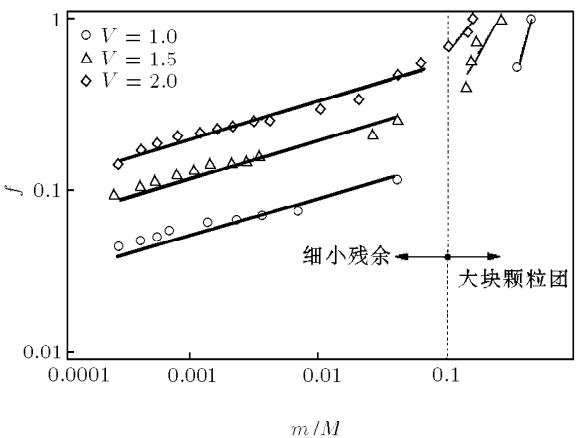


图 14 小颗粒碎块累加质量 (尺寸) 百分比 f 同归一化质量 m/M (尺寸) 的关系^[21]

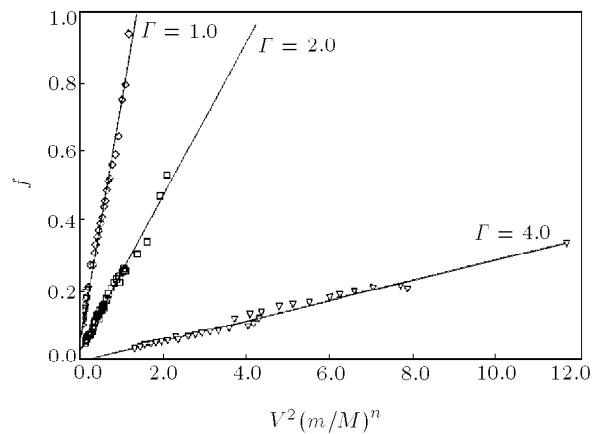


图 15 小颗粒碎块累加质量(尺寸)百分比 f 同 $V^2(m/M)^n$ 的关系 [21]

5 结语

微小颗粒聚合体碰撞破损能的细观力学模拟研究在近十几年来取得了很多成果。特别是利用颗粒离散单元法并结合理论接触力学理论，对这一常见物理现象机理进行了有益的探索，使人们对其有了十分崭新和深刻的认识。颗粒聚合体的碰撞模拟有着广泛的工业基础，特别是在矿物处理、传输传质、化工、农业、煤炭、制药、核电工业、环境等领域，其研究有十分重要的实践意义。目前还有许多需要纵深研究的内容，比如颗粒聚合体的强度影响因素研究、颗粒间内部接触模拟的本构关系，湿颗粒聚合体准确模拟问题，颗粒聚合体同流体力学结合模拟，非规则形状颗粒体的粘结和反弹，以及在纳米技术方面的应用前景（见文献[52]）等等。

现实当中，颗粒聚合体或结块是十分复杂的系统，目前的硬件和软件发展水平还无法满足模拟工业中聚团以及破损的真实处理过程。仅就单个颗粒聚合体的模拟，如何“制备”更为切合实际的聚合体模型无疑是需要深入研究的问题，同时离散体之间接触的本构关系，也是一个十分困难的研究领域。但是，这一研究的工业应用前景十分广阔。正如文[29]所说，仅就矿物处理工程而言，目前颗粒 DEM 技术只适合于颗粒间裂断，从而并不适用于模拟比沙石粘结更紧密的材料。但是，这一技术显然在破损块尺寸分布方面的研究十分有用。随着计算机硬件及速度的发展，直接模拟大量固体破碎过程（如碾磨）是可行的。另一方面，碰撞能量分析以及碎裂分布数据，可为有效合理设计破损设备提供服务。

致 谢 作者衷心感谢英国伯明翰大学 Thornton 博士和 Kafui 博士在以往的研究中给予的支持和帮

助，还要感激 Mishra 教授 (Indian Institute of Technology) 对本文的支持。

参 考 文 献

- Rumpf H. The strength of granules and agglomerates. In: Knepper W A, ed. Agglomeration, Proc. First Int. Symposium Agglomeration. New York: Interscience 1962. 379~414
- Arbiter N, Harris C C, Stamboltzis G A. Single fracture of brittle spheres. *Trans AIME*, 1969, 244: 118~133
- Shipway P H, Hutchings I M. Attrition of brittle spheres by fracture under compression and impact loading. *Powder Technology*, 1993, 76: 23~30
- Gentzler M, Michaels J N. Impact attrition of brittle structured particles at low velocities: rigorous use of a laboratory vibrational impact tester. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(24): 5949~5958
- Salman A D, Gorham D A, Verba A. A study of solid particle failure under normal and oblique impact. *Wear*, 1995, 186(7): 92~98
- Salman A D, Gorham D A. The fracture of glass spheres under impact loading. In: Behringer R P, Jenkins J T, eds. Powders and Grains '97, Proc of 3th Int Conf on Micromechanics of Granular Media. Rotterdam: Balkema A A, 1997. 563~566
- Salman A D, Reynolds G K, Hounslow M J. Particle impact breakage in particulate processing. *KONA*, 2003, 21: 88~99
- Adams M J, Mullier M A, Seville JPK. Agglomerate strength measurement using a uniaxial confined compression test. *Powder Technology*, 1994, 78: 5~13
- Samimi A, Ghadiri M, Boersejijn R. Effect of structural characteristics on impact breakage of agglomerates. *Powder Technology*, 2003, 130: 428~435
- Samimi A, Moreno R, Ghadiri M. Analysis of impact damage of agglomerates: effect of impact angle. *Powder Technology*, 2004, 143-144: 97~109
- Schubert W, Khanal M, Thomas J. Impact crushing of particle-particle compounds- experiment and simulation . *Int J Miner Process*, 2004, 75: 41~52
- Fu J, Adams M J, Reynolds G K, Salman A D, Hounslow M J. Impact deformation and rebound of wet granules. *Powder Technology*, 2004, 140: 248~257
- Cleaver J A S, Ghadiri M, Rolfe N. Impact attrition of sodium carbonate monohydrate crystals. *Powder Technology*, 1993, 76: 15~22
- Yuregir K R, Ghadiri M, Clift R. Impact attrition of sodium chloride crystals. *Chem Eng Sci*, 1987, 42: 843~853
- Potapov A V, Campbell C S. Computer simulation of impact-induced particle breakage. *Powder Technology*, 1994, 81: 207~216
- Yin K K. Numerical modelling of agglomerate degradation:[dissertation]. Birmingham: Aston University, 1992

- 17 Thornton C, Yin K K , Adams M J. Numerical Simulation of the impact fracture and fragmentation of agglomerates. *J Phys D: Phys*, 1996, 29: 424~435
- 18 Ciomocos M T. Micromechanics of agglomerate damage process:[dissertation]. Birmingham: Aston University, 1996
- 19 Thornton C M, Ciomocos T, Adams M J. Numerical simulations of agglomerate impact breakage. *Powder Technology*, 1999, 105(1): 74 ~82
- 20 Kafui K D, Thornton C. Computer simulated impact of agglomerates. In: Thornton C, ed. Powder & Grains'93, Proc. 2nd Int Conf Micromech. Granular Media. Rotterdam: Balkema, 1993. 401~406
- 21 Kafui K D, Thornton C. Numerical simulation of impact breakage of a spherical crystalline agglomerate. *Powder Technology*, 2000, 109: 113~133
- 22 Thornton C, Liu L. How do agglomerates break? *Powder Technology*, 2004, 143-144: 110~116
- 23 Ghadiri M, Papadopoulos D G, Bassam F, Subero J. Attrition of particulate solids. IFPRI annual report FRR 16-08, University of Surrey, 1996
- 24 Ning Z, Boerefijn R, Ghadiri M, Thornton C. Distinct element simulation of impact breakage of lactose agglomerates. *Adv Powder Technology*, 1997, 8: 15~37
- 25 Subero J, Ning Z, Ghadiri M, Thornton C. Effect of interface energy on the impact strength of agglomerates. *Powder Technology*, 1999, 105: 66~73
- 26 Subero J, Ghadiri M. Breakage patterns of agglomerates. *Powder Technology*, 2001, 120: 232~243
- 27 Moreno R, Ghadiri M, Antony S J. Effect of the impact angle on the breakage of agglomerates: a numerical study using DEM. *Powder Technology*, 2003, 130: 132~137
- 28 Kun F, Herrmann H J. A study of fragmentation processes using discrete element method. *Int J Mod Phys* , 1996, C7: 837~855
- 29 Mishra B K, Thornton C. Impact breakage of particle agglomerates. *Int J Miner Process* , 2001, 61: 225~239
- 30 Tsoungui O, Vallet D, Charmet J C. Numerical model of crushing of grains inside two-dimensional granular materials. *Powder Technology*, 1999, 105: 190~198.
- 31 Cundall P A, Strack O D L. A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*, 1979, 29: 47~65
- 32 Brown E T. Analytical and Computational Methods in Engineering Rock Mechanica. USA: Allen & Unwin, 1987 (中译本: Brown E T. 工程岩石力学中的解析与数值计算方法. 北京: 科学出版社, 1991)
- 33 王泳嘉, 邢纪波. 离散单元法及其在岩土力学中的应用. 沈阳: 东北大学出版社, 1991
- 34 徐泳, 孙其诚, 张凌, 黄文彬. 颗粒离散元法研究进展. 力学进展, 2003, 33(2): 253~260
- 35 刘凯欣, 高凌天. 离散元法研究的评述. 力学进展, 2003, 33(4): 483~490
- 36 Johnson K L. Contact Mechanics. Cambridge: Cambridge Univ Press, UK, 1985
- 37 Johnson K L., Kendall K, Roberts A D. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proc Roy Soc London*, 1971, A234: 301~313
- 38 Mindlin R D, Deresiewicz H. Elastic spheres in contact under varying oblique forces. *J Appl Mech Trans, ASME*, 1953, 20: 327~344
- 39 Thornton C. Interparticle relationships between forces and displacements. In: Oda M, Iwashita K,eds. Mechanics of Granular Materials. Balkema: Netherlands, 1999. 207~217
- 40 Savkoor A R, Briggs G A D. The effect of tangential force on the contact of elastic solids in adhesion. *Proc. Roy. Soc. London*, 1977, A356: 103~113
- 41 Thornton C, Ning Z. A theoretical model for the stick/bounce behaviour of adhesive elastic-plastic spheres. *Powder Technology* , 1998, 99: 154~162
- 42 Thornton C, Yin K K. Impact of elastic spheres with and without adhesion. *Powder Technology*, 1991, 65: 153~166
- 43 Thornton C. Interparticle sliding in the presence of adhesion. *J Phys D: Appl Phys* , 1991, 124: 1942~1946
- 44 Thornton C. Coefficient of restitution for collinear collisions of elastic-perfectly plastic spheres. *J of Applied Mechanics*, 1997,64: 383
- 45 Ghadiri M A, Papadopoulos D G . Impact attrition of particulate solids. International Fine Particle Research Institute Report , 1995
- 46 Liu L, Thornton C. Numerical simulation of impact breakage of cuboidal and cylindrical polydispersed agglomerates. Internal Report, Aston University, Birmingham, 1999
- 47 Lian G. Computer simulation of moist agglomerate collisions:[Ph D thesis], The University of Aston at Birmingham, 1994
- 48 Lian G, Adams M J, Thornton C. Elastohydrodynamic collisions of solid spheres. *J Fluid Mech*, 1996, 311: 141~152
- 49 Lian G, Thornton C, Adams M J. Discrete particle simulation of agglomerate impact coalescence. *Chemical Engineering Science*, 1998, 53(19): 3381~3391
- 50 Thornton C. Force transmission in granular media. *KONA Powder and Particle*, 1997, 15: 81
- 51 Thornton C, Antony S J. Quasi-static deformation of particulate media. *Philos Trans R Soc Lond*, 1998, A 356: 2763
- 52 Froeschke S, Kohler S, Weber A P, Kasper G. Impact fragmentation of nanoparticle agglomerates. *Aerosol Science*, 2003, 34: 275~287

MICROMECHANICS STUDY ON AGGLOMERATE IMPACT BREAKAGE

LIU Lianfeng [†]

Department of Engineering Technology, China University of Geosciences, Beijing 100083 China

Abstract Particulate materials are often in the form of powders which are themselves agglomerations of much smaller primary particles. A common problem in the handling of powders is the degradation due to attrition and/or fragmentation of agglomerates as they collide with each other and with the process equipment. Impact breakage has been studied experimentally for many years. However, information from those experiments is normally restricted to post-impact examinations of the fragments and debris produced during the short duration of an impact event. Numerical simulations of agglomerate impact fracture, especially using discrete element method, have achieved great successes over the past decade. New theories based on modern contact mechanics and new concepts have been proposed to study the mechanism of agglomerate impact breakage. This paper gives a brief review on the current development of the research, and also describes the simulation techniques of agglomerate impact.

Keywords Agglomerate, discrete element method, impact breakage, powders, micromechanics

~~~~~

## 《科技导报》征稿、征订启事

《科技导报》是中国科学技术协会学术会刊，设有卷首寄语、专题稿件、研究论文、综述文章、研究报告、学术争鸣、实验技术、科技评论、科学家之声等栏目，主要发表国内外科学和技术各学科专业原创性学术论文，同时刊登阶段性最新科研成果报告，读者对象为国内外一线科技工作者。

《科技导报》是中国科技论文统计源期刊（中国科技核心期刊），以“处理来稿周期短，报道成果时效强；探究问题起点高，研讨思路视野宽；提出对策着眼远，争鸣学术气氛浓；刊载信息密度大，排版印刷质量好”为特色，是一本有影响、有特色、有品位的高层次、高水平、高质量科技类学术期刊。

《科技导报》2007年为半月刊，全文彩色印刷，每册定价7.00元，国内邮发代号2-872，国外发行代号M3092。欢迎投稿，欢迎订阅。

通讯地址：北京市海淀区学院南路86号科技导报社（邮编100081）

联系电话：010-62103282（编辑部） 010-62175871（办公室）

投稿信箱：kjdbbjb@cast.org.cn

征订信箱：kjdb@cast.org.cn

---

<sup>†</sup> E-mail: lianfengliu@cugb.edu.cn