

DEM modeling of mechanical behavior of partially sintered ceramics

Zengxu ZHANG^{1,2}, Yongchang WANG^{1,2}, Yin YU³, Xiaoxing LIU^{1,2*}

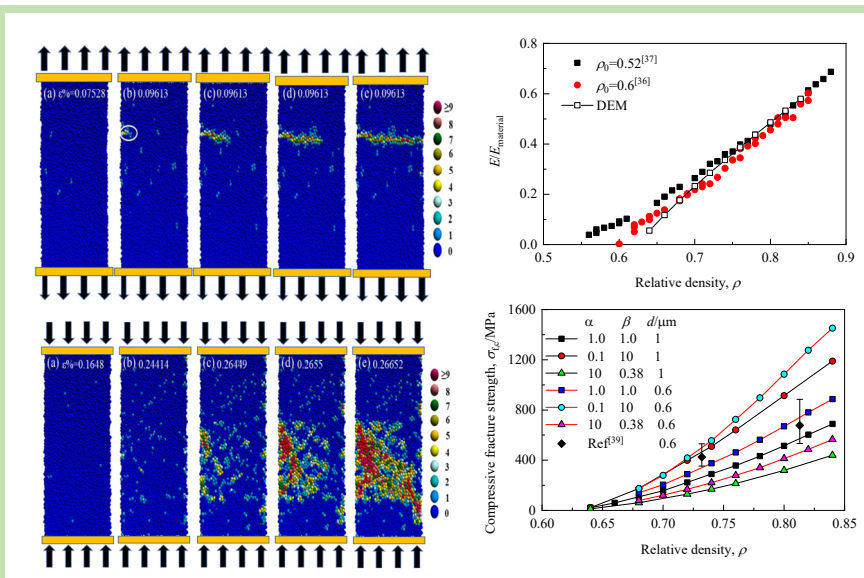
1. State Key Laboratory of Multiphase Complex Systems, Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

2. School of Chemistry and Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

3. Nation Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, Chinese Academy of Engineering Physics, Mianyang, Sichuan 621900, China

Abstract: In this work, the mechanical behavior of partially sintered ceramics under both tensile and compressive loadings was investigated by performing 3D discrete element method (DEM) simulations. The simulation results indicated that the failure of samples under tensile loading was dictated by the nucleation of crack, whereas for compressive loading it was linked to the coalescence of cracks. By monitoring the time sequence of bond breakage and its failure mode, it was found that for tensile loading the dominate failure mode of bond was tensile fracture, whereas for compressive loading it was shear fracture. The fracture strength of sample was closely related to the critical tensile ($\sigma_{c,t}$) and shear ($\sigma_{c,s}$) fracture strengths of bond. As to the partially sintered alumina ceramics considered in this work, it was found that the predicted tensile and compressive fracture strengths can both be in quantitative agreement with experimental data. The simulation results indicated that the influence of the distribution of bond strength on the compressive fracture strength of sample was minor. While for tensile fracture strength, it depended on the type of distribution: for Gaussian distribution, the strength of sample only weakly depends on the distribution width, whereas for uniform distribution, the strength of sample decreases notably with the increase of distribution width.

Key words: partially sintered ceramic material; Al_2O_3 ; tensile loading; compressive loading; fracture strength; discrete element method



收稿: 2020-04-03, 修回: 2020-05-18, 网络发表: 2020-06-04, Received: 2020-04-03, Revised: 2020-05-18, Published online: 2020-06-04
基金项目: 国防科技重点实验室基金项目(编号: 6142A03182010); 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金资助(编号: U1630105); 国家重点研发计划政府间国际科技创新合作专项磁约束核聚变能发展研究(编号: 2017YFE0300602); 多相复杂系统国家重点实验室自主研究课题(编号: MPCs-2019-A-04)
作者简介: 张增绪(1992-), 男, 陕西省商洛市人, 硕士研究生, 化学工程专业, E-mail: zhangzengxu17@mails.ucas.ac.cn; 刘晓星, 通讯联系人, E-mail: xxliu@ipe.ac.cn.

引用格式: 张增绪, 王永昌, 喻寅, 等. 部分烧结陶瓷材料力学特性的 DEM 模拟. 过程工程学报, 2021, 21(3): 341-352.
Zhang Z X, Wang Y C, Yu Y, et al. DEM modeling of mechanical behavior of partially sintered ceramics (in Chinese). Chin. J. Process Eng., 2021, 21(3): 341-352, DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.220116.

部分烧结陶瓷材料力学特性的 DEM 模拟

张增绪^{1,2}, 王永昌^{1,2}, 喻寅³, 刘晓星^{1,2*}

1. 中国科学院过程工程研究所多相复杂系统国家重点实验室, 北京 100190

2. 中国科学院大学化学与化工学院, 北京 100049

3. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 四川 绵阳 621900

摘要:通过开展三维离散单元法数值模拟,考察了部分烧结陶瓷在单轴拉伸和压缩加载条件下的力学响应行为。模拟结果表明,拉伸加载下试样的破坏表现为裂纹“成核”效应,而压缩加载下则呈现为裂纹“聚并”效应;通过追踪固体键的断裂顺序和断裂模式发现,拉伸加载下固体键的破坏主要源于拉伸作用,而压缩加载下则为剪切作用。试样的宏观断裂强度与固体键临界拉伸强度 $\sigma_{c,t}$ 和临界剪切强度 $\sigma_{c,s}$ 有关。对于考察的部分烧结 Al_2O_3 陶瓷材料, $\sigma_{c,t}=\sigma_{c,s}$ 下模拟得到的试样拉伸强度和压缩强度能与实验数据定量吻合。压缩加载下,固体键断裂强度的分布形式和分布宽度对试样断裂强度的影响较小;拉伸加载下,试样断裂强度取决于固体键的分布形式:高斯分布时,试样断裂强度基本不受分布宽度的影响;均匀分布时,试样断裂强度随分布宽度的增大而减小。

关键词:部分烧结陶瓷材料; Al_2O_3 ; 拉伸加载; 压缩加载; 断裂强度; 离散单元法

中图分类号: TQ174.1

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2021)03-0341-12

1 前言

陶瓷材料具有硬度高、强度大、耐热、耐腐蚀等优点,在填料、膜分离、燃料电池、催化剂基体、仿生骨骼等不同领域得到了广泛应用^[1,2]。在膜分离和催化等应用中,为保证运输/反应功能性,即流体在陶瓷材料内部的流动、扩散、吸附、反应等,需确保陶瓷材料具有一定的空隙率^[2-4]。一般空隙率越大,越有利于其运输/反应功能性。另一方面,陶瓷材料的力学属性与其空隙率密切相关,研究表明^[1,3-6],陶瓷材料的力学强度会随空隙率增大而急剧降低。因此,在陶瓷材料开发过程中,保证其最佳的力学性和最优的运输/反应功能性往往不能兼顾^[1,4]。陶瓷材料的空隙率来源于两部分:烧结过程中晶粒间自然形成的孔隙、造孔剂汽化后留下的孔洞。对于给定的空隙率,可通过选择造孔剂尺寸及控制造孔剂的空间分布得到不同微观结构的陶瓷材料。在相同空隙率下,无论运输/反应功能性^[2]还是力学性能^[5,6]均与陶瓷材料的微观结构密切相关。因此,探索和建立陶瓷材料微观结构与其宏观力学响应特性之间的内在联系,对于指导陶瓷材料微观结构的优化设计以实现材料功能性和力学性的最优匹配具有重要意义。

随着计算能力提高及相关理论进一步完善,数值模拟逐渐被广泛用于分析和预测陶瓷材料的力学特性。在诸多数值模拟方法中,离散单元法(Discrete Element

Method, DEM)由于在处理微观结构以及非连续界面等方面的优势,在陶瓷材料力学分析领域得到了广泛应用。在 DEM 的模拟框架下,陶瓷材料被处理为由一系列相互绑定的微观颗粒构成的集合体,其在外加载作用下的力学演化行为可通过计算微观颗粒之间的力学作用而得到^[7,8]。Jauffres 等^[9,10]基于三维 DEM 模拟,考察了部分烧结陶瓷材料微观结构对其宏观力学属性的影响。Hedjazi 等^[11]通过开展离散单元法数值模拟考察了脆性材料内孔洞对裂纹扩展特性的影响规律。Huang 等^[12]在 DEM 中引入热传导模型,研究了温度场如何导致核燃料陶瓷颗粒内部裂纹形成与扩展。Tan 等^[13,14]基于离散单元法商业软件 PFC2D 考察了切削过程中 Al_2O_3 和 SiC 材料表面微观裂纹的形成及扩展。Yu 等^[15-17]基于二维离散单元法数值模拟,研究了冲击加载下陶瓷材料内微观缺陷对冲击能量吸收的影响规律。在前期工作中^[3,4,18,19],本课题组研究了多孔陶瓷在拉伸和压缩作用下的力学响应特性,通过在经典的 Hertz 模型中引入反映多体面接触下应力耦合效应的校正因子,准确定量地预测了材料宏观力学属性随空隙率的变化以及材料内部孔洞-孔洞之间的力学耦合效应。

采用 DEM 模拟研究陶瓷材料时,首先需要制备宏观连续的数值“试样”。常见的方法是首先采用压缩策略得到紧密堆积的离散颗粒物料,随后基于颗粒半径和颗粒间相对位置,在颗粒之间设置虚拟的固体键,从而将

所有颗粒绑定在一起^[7]。这一策略实现起来简单,但带来的最大问题是固含率的物理意义不明确(固体键的尺寸)。为了实现模拟结果和实验数据的定量吻合,通常需要对固体键属性进行试差校正,从而限制了数值模拟的定量预测性。另一种策略是基于离散单元法,直接模拟颗粒烧结过程^[2,20]。在采用准确的烧结动力学模型的前提下,该策略能得到材料微观结构和固含率之间的定量对应关系,而其缺点是极其耗时。在前期工作^[19]中,本课题组将这两种策略的优点结合起来,首先采用应力伺服机制将“粒子气”压缩至不同的空隙率,随后基于烧结动力学计算颗粒间固体键的半径。基于应力伺服机制压缩颗粒物料仍然极其耗时,这主要是因为颗粒物料的离散性使外荷载在其内部的分布极其不均匀,系统内部易形成架拱结构^[21]。为最小化架拱结构所带来的空隙率空间非均匀性,模拟必须采用很小的应力增量,从而增加了计算量。为加速颗粒压缩过程的模拟,Kumar 等^[22]提出了一种 Affine 场密化策略。该策略将模拟试样假设为弹性体,进而基于均匀弹性应变压缩颗粒物料。在大应变条件下,离散的颗粒物料显然不是弹性体。Kumar 等认为当颗粒物料已经处于紧密堆积状态时,进一步压缩颗粒物料,在不形成局部剪切带的前提下,颗粒之间的相对排列应该不会发生大的改变,而 DEM 模拟中所需要的仅是颗粒之间的相对排列构型。本工作采用 Kumar 等提出的 Affine 场策略制备数值试样。

类似于有限元(Finite Element Method, FEM)模拟,在开展陶瓷材料力学损伤的 DEM 模拟之前,需要给出合适的准则来判断晶粒间固体键是否发生断裂^[7]。晶粒间的固体键即可在法向方向发生拉伸断裂,也可在切向方向形成剪切断裂。因此 DEM 模拟中必须设定固体键的临界拉伸强度 $\sigma_{c,t}$ 和临界剪切强度 $\sigma_{c,s}$ 。而 $\sigma_{c,t}$ 和 $\sigma_{c,s}$ 之间的内在联系,譬如两者之间是否存在确定的比例关系($\alpha = \sigma_{c,t}/\sigma_{c,s}$),目前还没有定论。在文献报道的 FEM 和 DEM 相关工作中,研究人员一般基于试差的方法,通过比较模拟结果和实验数据来校正 $\sigma_{c,t}$ 和 $\sigma_{c,s}$ 的数值^[13,14,23,24]。值得注意的是,已有的文献报道中,即使是对于相同的材料,不同学者采用的 α 数值能够达到近两个量级的差别。以 Al_2O_3 陶瓷材料为例,Tan 等^[13,14]认为 $\sigma_{c,t}$ 远小于 $\sigma_{c,s}$,但他们未给出具体的 α 值。基于他们后期的 SiC 陶瓷材料 DEM 模拟工作^[23],可推测 $\alpha \approx 0.1$ 。他们模拟了单轴压缩、三点压缩等不同力学加载方式下材料的力学响应行为,发现模拟结果能够与实验数据定量吻合。在 Martin 等^[25]及本课题组前期工作中^[3,4,18,19], $\alpha=1$,模拟结果表明,DEM 预测得到的材料杨氏模量、断裂强度、泊松比等都能与实验结果定量吻合。Eckhard

等^[26]通过开展三维 DEM 模拟研究了压缩加载下 Al_2O_3 颗粒的破碎行为。在他们的模拟中, $\alpha=18$,模拟结果也能与实验结果定量吻合。

理论上,宏观陶瓷材料的断裂行为应与其微观晶粒间固体键(即晶界)的拉伸和剪切断裂属性有关。为何对于相同的陶瓷材料,采用完全不同的 α 值,DEM 模拟都能得出与实验数据相吻合的结果?本工作将通过分析拉伸和压缩加载下部分烧结 Al_2O_3 陶瓷材料的破坏过程和破坏模式,对这一问题进行探索。研究表明,对于试样拉伸强度和压缩强度,如果仅考虑其中之一,不同的 α 值条件下,通过调整模型参数,DEM 模拟都能够给出与实验数据定量吻合的结果。如果要保证试样拉伸强度和压缩强度都与实验数据定量吻合,只存在唯一的 α 。 α 的具体数值与模拟系统的维度有关,出现这种现象的根本原因在于:二维模拟下,无论是压缩加载还是拉伸加载,晶粒间固体键主要是发生拉伸破坏;三维模拟时,拉伸加载下晶粒间固体键的断裂主要是源于拉伸作用,而压缩加载下则主要是源于剪切作用。

2 DEM 接触模型

图 1 给出了本工作中所采用的 DEM 力学模型示意图。模拟中颗粒之间可能存在三种不同的作用形式:初始时刻两者之间无固体键,但随着加载的进行发生几何接触的颗粒作用对(No-bonded);初始时刻通过固体键绑定在一起、且当前时刻为固体键仍未断裂的颗粒作用对(Bonded);初始时刻两者之间存在固体键,加载过程中固体键断裂,随后再次形成几何接触的颗粒作用对(Bond-broken)。表 1 列出了三种状态下颗粒之间的接触作用,详细的模型介绍可参考前期工作^[4,19]。本研究仅重点介绍相关的颗粒转动和固体键断裂模型。

切向力会使颗粒形成旋转运动。将颗粒质心间的连线定义为法向的话,颗粒旋转可以分解为法向旋转和切向旋转,如图 1 所示,其中法向旋转指的是以质心连线为轴、旋转方向平行于接触面的转动。需要指出的是,只有在三维模拟中才能考虑法向旋转,二维情况下只有切向旋转^[7]。固体键显然会限制颗粒的旋转能力,因此有必要引入转动阻力矩以反映颗粒的有限旋转,如图 1 所示。

与前期工作^[4,19]一致,本研究中法向和切向方向的转动阻力矩计算公式如下:

$$M_N = -\frac{8ER^3}{(2-\nu)(1+\nu)}f_T a^3 \theta^N \quad (1)$$

$$M_T = -\frac{2ER^3}{(2-\nu^2)}f_N a^3 \theta^T \quad (2)$$

其中, θ^N 和 θ^T 分别表示法向方向和切向方向的颗粒相对转动角度。

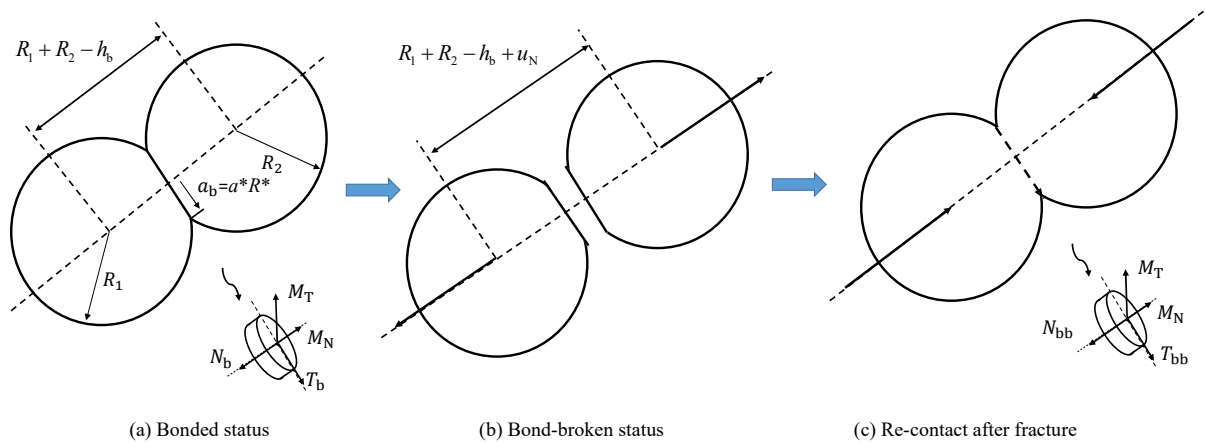


图1 固体键作用示意图

Fig.1 Schematic of bond contact

表1 DEM作用模型
Table 1 DEM contact models

Type		Equation
No-bonded	Normal force	$N_c = \frac{4}{3} \frac{E}{1-\nu^2} \frac{a^3}{2R^*} - 2\pi w R^*$
	Tangential force	$ T_c = \min \left\{ \frac{2Ea}{(2-\nu)(1+\nu)} u_t, \mu N_c \right\}$
Bonded	Normal force	$N_b = \frac{E}{1-\nu^2} f_N a_b u_N$
		$T_b = \frac{2E}{(2-\nu)(1+\nu)} f_T a_b u_T$
	Tangential force	$f_N = \frac{1+a^* \left[\frac{\pi}{6} (1-\nu^2) (1+2a^*) - a^* \right]}{\sqrt{1-a^{*2}} - \psi \left\{ a^* + a^{*2} \left[\frac{\pi}{6} (1-\nu^2) (1+2a^*) - a^* \right] \right\}}$ $f_T = \frac{1+a^* \left[\frac{\pi}{6} (1-\nu^2) (1+2a^*) - a^* \right]}{\sqrt{1-a^{*2}}}$
Bond-broken	Normal force	$N_{bb} = N_b - 2\pi w R^*$
	Tangential force	$T_{bb} = \min(T_b, \mu N_{bb})$

当达到某个临界应力状态时, 固体键会因拉伸、剪切和/或扭转作用而发生断裂, 模拟中所采用的固体键断裂准则如下^[19]:

$$\sigma_{\text{tension}} = -\frac{N_b}{\pi a^{*2} R^2} + 4 \frac{|M_b^T|}{\pi a^{*3} R^3} > \sigma_{c,t} \quad (3)$$

$$\sigma_{\text{shear}} = \frac{T_b}{\pi a^{*2} R^2} + 2 \frac{|M_b^N|}{\pi a^{*3} R^3} > \sigma_{c,s} \quad (4)$$

在本工作中, 为了研究固体键临界拉伸断裂强度 $\sigma_{c,t}$

和临界剪切断裂强度 $\sigma_{c,s}$ 间比例关系对材料宏观断裂强度的影响, 考察了 $\alpha=0.1, 1, 10$ 三种情况, $\sigma_{c,s}$ 由以下公式计算^[3,27,28]。

$$\sigma_{c,s} = \beta \sqrt{\frac{E}{1-\nu^2} \frac{\Gamma}{\pi a_b}} \quad (5)$$

其中, 当 $\alpha=1$ 时 $\beta=1$; 其他情况下 β 的数值通过与实验结果拟合得到。如无特别说明, 所有数据都是指 $\alpha=1$ 和 $\beta=1$ 下得到的模拟结果。式5中 Γ 为固体键的断裂韧度, 其值近似为两倍的表面自由能 $2\gamma_s$ ^[27]。

3 数值试样制备

图2为数值试样的制备过程示意图。模拟中,首先在计算域中随机生成给定数目的颗粒,并保证颗粒之间不会形成几何重叠。颗粒的尺寸均匀分布于 $(0.95, 1.05)\bar{d}$ 以避免规则晶格结构的形成[图2(a)]。在 z 方向,即拉伸和压缩测试中的力学加载方向,上下边界设置为固体壁面,而在 x 和 y 方向则采用周期性边界。模拟中,交替基于 Affine 场和牛顿定律更新颗粒位置:在第一个时间步采用 Affine 场策略,基于应变率 ε_1 移动颗粒和缩小模拟区域,在第二个时间步中计算颗粒之间的作用力、颗粒加速度和速度,进而更新颗粒位置[图2(a)→图2(b)];当试样的空隙率达到0.40时[图2(c)],停止 Affine 场压缩,并每隔1000个时间步随机更新一次颗粒速度(速度方向和速度大小)。模拟结果表明,当颗粒速度经过10次左右的随机更新,即可完全消除图2(a)到图2(b)过程中因 Affine 场策略所导致的结构各向异性[22];随后以应变率 ε_2 为准,再次执行 Affine 场策略,并结合牛顿定律,压缩系统至不同的固含率[图2(c)→图2(d)]。辅助的模拟结果表明,当 $\varepsilon_2 \leq 10^{-7}$ 时,所得试样的颗粒接触数 Z 和颗粒接触尺寸 a_b 与基于应力伺服机制得到的模拟结果无明显差别。

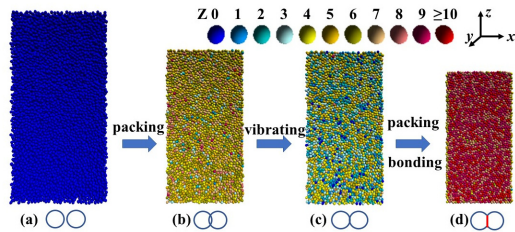


图2 数值试样制备过程(颜色代表颗粒接触数 Z)

Fig.2 Procedure of sample generation (color represents the coordination number of particle)

对于所制备的数值试样,将其在 x 和 y 方向的边界设置为自由表面;随后以颗粒间的质心距离 h_b 为标准,当 $h_b < (R_1 + R_2)$ 时,将这两个颗粒通过固体键绑定在一起[图2(c)→图2(d)]。图2(a)→图2(b)和图2(c)→图2(d)所示的 DEM 模拟过程中并未考虑颗粒变形,颗粒间接触面半径 a 由公式 $\sqrt{(R_1^2 - a^2)} + \sqrt{(R_2^2 - a^2)} = h_b$ 计算得到。如果将 a 直接设置为固体键的半径,将会导致体积不守恒。实际烧结过程中,晶粒间的晶界是通过烧结颗粒间的质量扩散而形成[29]。因此,参考 Martin 等的 DEM 模拟结果[30],本研究中颗粒间固体键的半径 a_b 由 Coble 模型[31]计算:

$$a_b^2 = 4R^*h_b \quad (6)$$

图3给出了图2(c)→图2(d)过程中颗粒接触数 Z 和固体键半径 a_b 随固含率的变化,插图给出了 $\rho=0.74$ 下 a_b 的概率分布。图3表明, Z 和 a_b 都随固含率的增大而非线性增大。定性上,该结果与前期烧结过程 DEM 模拟的结果相吻合[4]。但相比于直接模拟烧结过程,基于应力伺服机制[19]及本研究中基于 Affine 场压缩模拟得到的 Z 和 a_b 数值要稍大。

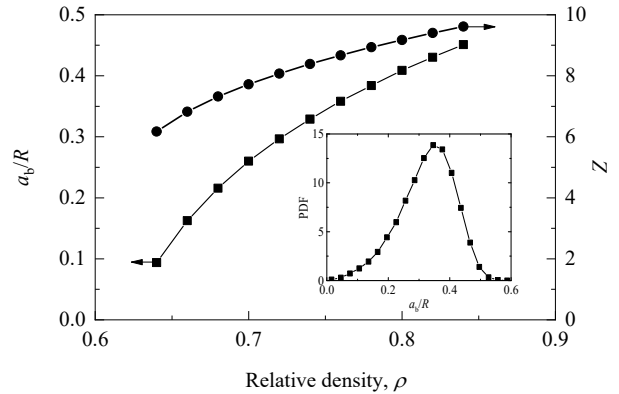


图3 颗粒接触数 Z 和固体键尺寸 a_b 随固含率的变化
Fig.3 Variations of particle coordination number Z and bond radius a_b with relative density

在单轴拉伸和压缩模拟中,保持试样底部边壁静止不动,上边壁以恒定速度 εH (ε 为应变率, H 为试样在加载方向的高度)向上/下移动直至试样断裂。模拟中保证 ε 的数值足够小以确保 $I = \varepsilon \bar{d} / \sqrt{\frac{\sigma_{zz}}{\rho}} \ll 10^{-3}$,即系统始终处于拟静态[32]。为加快数值模拟的进度,模拟中在确保 $I < 10^{-3}$ 的前提下,依据 σ_{zz} 数值逐步放大颗粒密度以增大时间步长[4,33,34]:

$$\Delta t = 0.02 \sqrt{m^* / \left(f_N \frac{E}{1-\nu^2} a_b \right)}, \quad m^* = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (7)$$

本工作中,试样尺寸统一取为 $30\bar{d} \times 30\bar{d} \times 60\bar{d}$ 。由于几何效应,边壁附近的固含率一般要低于试样中心处的固含率[35]。这使得在拉伸作用下,裂纹更容易在边壁处形成。由于本研究工作的主要目的是考察试样本身的力学特性,因此在所有拉伸模拟算例中,将位于壁面附近($\leq 5\bar{d}$)的固体键的断裂强度设置为无穷大,以避免在壁面附近形成裂纹。材料属性采用 Al_2O_3 材料的物性,颗粒平均直径为 $1\mu\text{m}$,如表2所示,以便与文献[36,37]的实验结果进行定量对比。

表2 模拟参数设置

Table 2 Simulation parameter setting

Young's modulus, E/GPa	Poisson ratio, ν	Surface energy, $\gamma_s/(\text{J}/\text{m}^2)$	Frictional coefficient	Particle size, $\bar{d}/\mu\text{m}$
400	0.25	1	0.5	1

4 结果与讨论

4.1 试样破坏过程

图4为拉伸和压缩加载下典型的应力应变曲线。可以看到,在加载的初期阶段,应力随着应变的增大而线性增大,且拉伸曲线和压缩曲线完全重叠。这是因为应力应变曲线线性段的斜率即为试样的杨氏模量。对于给定的试样,拉伸测试和压缩测试得到的杨氏模量应该完全相等。拉伸作用下,模拟试样呈现出典型的脆性破坏特征:一旦试样的应力超过某个临界值,进一步增大应变会使得试样迅速断裂,应力急剧减小至0。压缩加载条件下,在应力达到峰值之前(图中的bc段),应力应变曲线逐渐偏离线性变化,即模拟试样呈现出一定的塑性特征;当应力达到峰值后,进一步增大应变会使应力急剧降低。与拉伸加载不同,压缩加载下即使固体键断裂,颗粒间的相互挤压使得模拟试样仍可承受一定的压缩作用,因此应力不会急剧降至0。

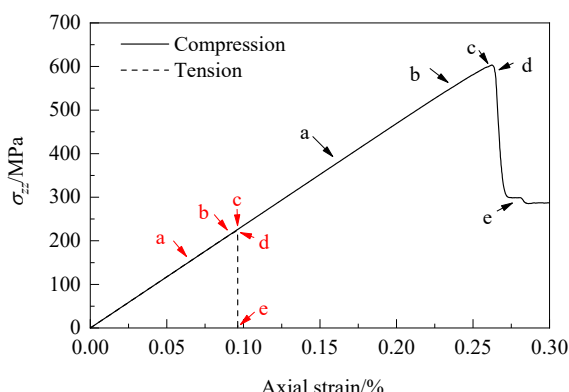
图4 拉伸和压缩加载下应力随应变的变化($\rho=0.82$)Fig.4 Variations of stress with strain for tensile and compressive loadings ($\rho=0.82$)

图5给出了拉伸加载下试样的破坏过程,图中颗粒的颜色表示与该颗粒相连的固体键的断键数目。图5表明,在应力达到峰值之前[图5(a)],试样内部已有少数固体键发生破坏。在临界应变附近,试样表面首先形成明显的微裂纹[图5(b)],该裂纹随后在垂直于加载方向迅速扩展[图5(c)~5(d)],直至贯穿整个试样[图5(e)]。与此对应,应力在此过程中急剧减小至0,见图4。图5表明,拉伸加载下,试样的破坏呈现一种“成核”效应,

即一旦某个关键破坏区[图5(b)中的白色圆圈区域]形成,试样立即断裂。

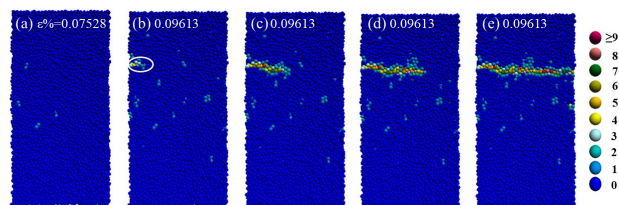
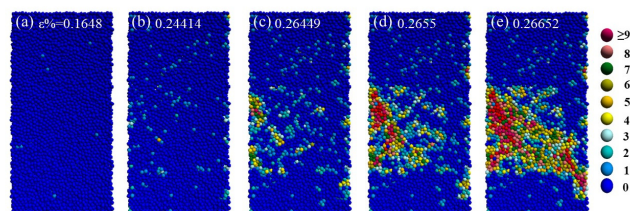
图5 典型的拉伸破坏过程($\rho=0.82$)Fig.5 Typical failure process for tensile loading ($\rho=0.82$)

图6给出了压缩加载下试样的典型破坏过程。类似于拉伸加载,在加载初期、应力远未达到峰值之前,试样内部已有少数固体键断裂[图6(a)];在进入塑性变形阶段后[图6(b)~6(c)],断裂固体键的数目逐渐增多,且在试样表面附近形成了明显的应力损伤区[图6(c)];随着应变进一步增大,在试样内部也逐渐形成局部应力损伤区[图6(d)],这些损伤区域逐渐相连,最终形成贯穿整个水平截面的损伤带[图6(e)]。图6表明,不同于拉伸加载下的成核破坏模式,压缩加载下试样的破坏呈现为一种“聚并”效应,力学损伤在试样内不同区域逐步形成,试样的完全破坏是这些局部损伤聚并和贯通的结果。

图6 典型的压缩破坏过程($\rho=0.82$)Fig.6 Typical failure process for compressive loading ($\rho=0.82$)

离散单元法数值模拟中,固体键的断裂有拉伸破坏和剪切破坏两种模式。模拟中固体键的主导破坏模式与固体键拉伸强度和剪切强度的比值 α 有关^[7]。此处仅给出 $\alpha=1$ 下模拟得到的固体键破坏模式,这主要是因为在本研究考察的三种情况下($\alpha=0.1, 1, 10$),仅 $\alpha=1$ 能得到合理的模拟结果。

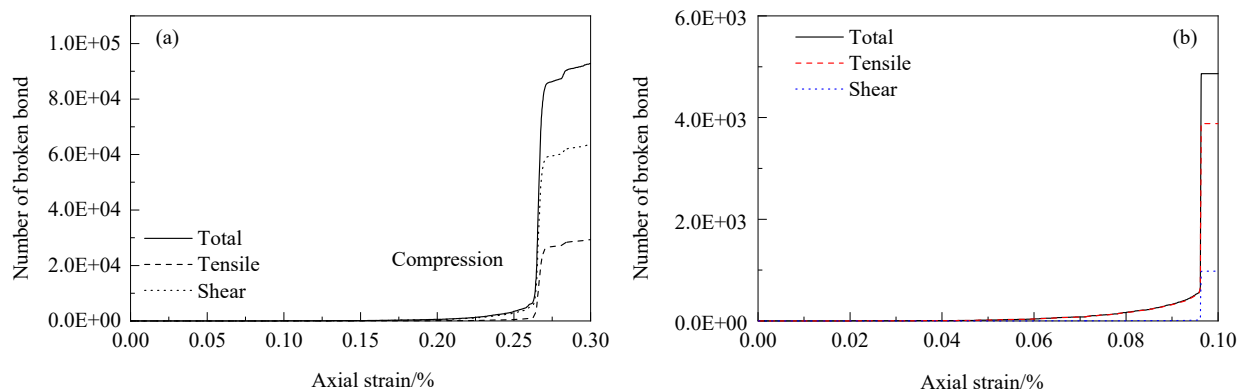
图 7 断键数目随应变的变化($\rho=0.82$)Fig.7 Variations of number of broken bond with strain ($\rho=0.82$)

图 7 给出了图 5 和 6 所示的拉伸和压缩加载模拟中固体键的断裂数目随应变的变化。图 7 表明, 拉伸加载下试样内固体键的断裂主要源于拉伸作用, 而压缩加载下则主要源于剪切作用; 压缩加载下, 在试样完全破坏之前, 拉伸所导致的固体键断裂几乎可忽略。这一结果似乎与已有的文献报道相矛盾。Potyondy 等^[7]基于二维 DEM 商业软件 PFC2D 考察了压缩作用下试样的破坏过程, 模拟中固体键的临界剪切强度等于临界拉伸强度。他们的模拟结果显示拉伸作用是固体键断裂的主要原因。Warner 等^[24]的二维 FEM 模拟结果也显示压缩加载下模拟试样的破坏主要源于晶粒间的拉伸作用。辅助的二维模拟结果表明, 这两种完全相反的模拟结果源自数

值模拟中所考虑的维度(二维模拟 vs. 三维模拟)。二维模拟结果与文献[7,24]模拟结果一致, 即压缩加载下固体键的主要断裂模式为拉伸断裂。为进一步检验本研究相关工作相关模拟结果的合理性, 采用法国格勒诺布尔大学开发的离散单元法软件 dp3D 进行了三维压缩加载模拟, 模拟结果同样表明试样破坏过程中固体键的主导破坏模式为剪切破坏。为探究二维模拟和三维模拟为何会得到定性上完全相反的结果, 针对压缩加载下发生断裂的固体键, 分析了式(3)和(4)中平动项($-\frac{N_b}{\pi a^2 R^2}$, $\frac{T_b}{\pi a^2 R^2}$)对固体键应力的贡献, 结果如图 8 所示。

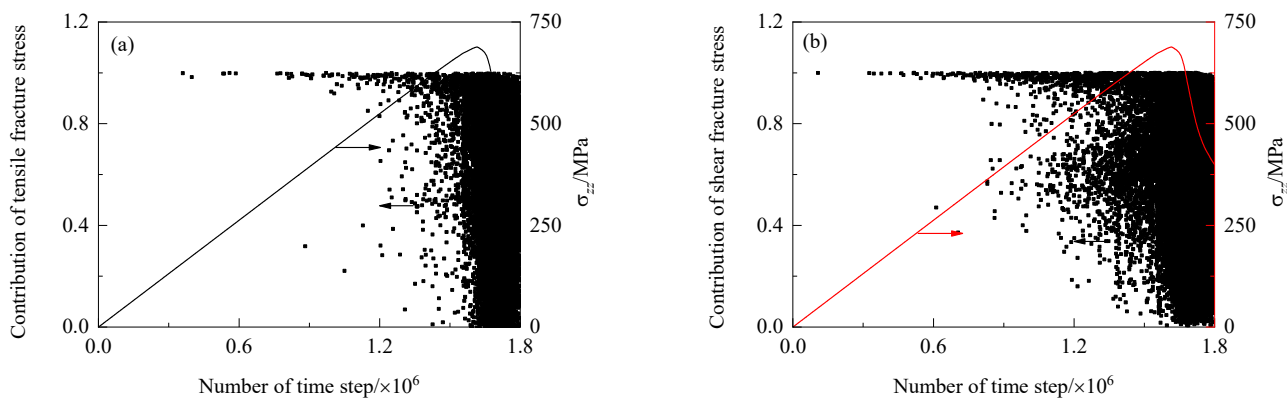
图 8 压缩加载下平动项对固体键拉伸应力(a)和剪切应力(b)的贡献($\rho=0.82$)Fig.8 Contributions of translation term to tensile fracture stress (a) and shear fracture stress (b) of broken bond under compressive loading ($\rho=0.82$)

图 8 表明, 在压缩加载的初期阶段, 颗粒间的相对平动运动是导致固体键断裂的主要原因; 随着应变增大, 无论是拉伸应力还是剪切应力, 颗粒间相对转动的贡献都不可忽略; 对于剪切应力, 转动的贡献甚至超过了平动的贡献。这解释了为何二维压缩模拟中固体键主

要发生拉伸破坏: 二维条件下, 颗粒只能沿切向转动, 颗粒转动对剪切应力没有贡献[式(4)中等号右侧第二项 $2\frac{|M_b^N|}{\pi a^3 R^3}$ 等于 0], 即剪切应力完全源自切向力^[7]; 而三维条件下, 如图 1(a)所示, 颗粒在法向和切向都可转动。

图8表明,二维模拟中固体键主要发生拉伸断裂是因为无法考虑颗粒在法向的转动,即忽略了颗粒转动对剪切应力的贡献。由图7和8可知,如果离散单元法模拟中所关注的问题与固体键的断裂模式密切相关,则有必要进行三维模拟。图8也说明在DEM模拟中考虑颗粒转动的必要性。Wang等^[38]对此问题进行了详细的讨论。他们的研究表明,在采用DEM模拟含预制斜裂纹试样的压缩破坏时,只有考虑颗粒旋转自由度才能得到与实验结果一致的翅型裂纹型式。

4.2 固体键属性对材料力学特性的影响

由应力应变曲线可得到试样的杨氏模量和拉伸/压缩断裂强度。针对相同的数值试样,考察了固体键临界拉伸强度与临界剪切强度的比值 $\alpha=0.1, 1$ 和 10 对模拟结果的影响。 α 反映固体键的断裂属性,其数值仅影响试样的断裂强度。

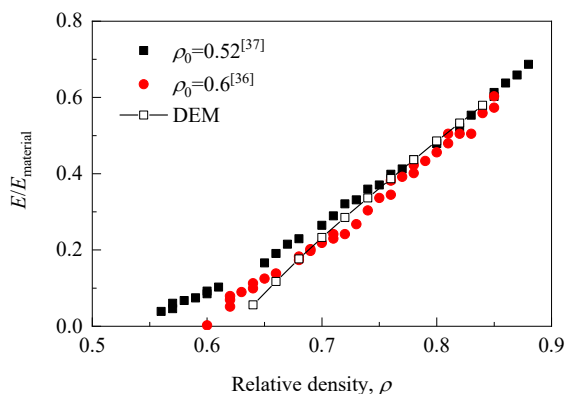


图9 杨氏模量随试样相对密度的变化
Fig.9 Variations of Young's modulus with the relative density of sample

图9给出了模拟预测的杨氏模量 E 随试样相对密度($\rho = \Sigma V_p / V$, V_p 为颗粒体积)的变化规律。作为对比,图中也给出了Ostrowski等^[36,37]的实验结果。Ostrowski等的实验试样是由平均粒径为 $1\ \mu\text{m}$ 的 Al_2O_3 粉末经高温烧结得到,他们考察了 Al_2O_3 粉末堆积密度(ρ_0)对所制 Al_2O_3 陶瓷材料杨氏模量的影响。他们的研究表明,对于相同密度的 Al_2O_3 陶瓷试样,较小的 ρ_0 会使得 E 较大。前期研究^[4]表明,这主要是因为初始粉末堆积密度会显著影响所制备得到的陶瓷试样的微结构:降低 ρ_0 会减小晶粒接触数 Z ,但会增大晶粒间接触尺寸 a_b 。本研究工作的数值试样制备过程中,在 $\rho=0.6$ 条件下对颗粒进行了多次随机扰动,随后再进行Affine场压缩加载[图2(c)→图2(d)],从试样制备角度更接近Ostrowski等^[36]的试样制备过程($\rho_0=0.6$)。由图9可看出,模拟得到的试

样杨氏模量随相对密度的变化与实验结果能很好地定量吻合。需要指出的是,本研究工作的模拟结果与前期模拟结果^[19]略有区别。这主要是因为本研究工作采用了不同的数值试样制备方法,所得到的数值试样微结构(Z, a_b)与前期模拟试样略有区别。

固体键拉伸强度与剪切强度的比值(α)会影响材料的断裂强度。本研究的目的是通过调整 α 及剪切强度(β)实现拉伸断裂强度和压缩断裂强度均能与实验值定量吻合,即对于给定的试样,考察是否存在不同的 α 和 β 组合,使拉伸结果和压缩结果均能与实验数据吻合。首先基于 $\rho=0.74$ 数值试样,以拉伸加载结果为准,对 α 和 β 的数值进行了拟合,结果表明,对于 $\alpha=0.1, 1, 10, \beta=10, 1, 0.38$,模拟得到的拉伸断裂强度基本相同,如图10中的插图所示。在此基础上,采用相同的 α 和 β 值,模拟预测了不同相对密度试样的拉伸断裂强度,结果如图10所示。可以看到,三种参数设置条件下模拟得到的拉伸断裂强度非常接近,均与实验结果吻合良好。这说明对于拉伸加载,存在不同的(α, β)组合,使得模拟得到的试样拉伸断裂强度近似相同。需要指出的是,三种参数设置下,固体键的主导断键模式存在差别, $\alpha=0.1, \beta=10$ 和 $\alpha=1, \beta=1$ 下固体键主要发生拉伸断裂; $\alpha=10, \beta=0.38$ 时固体键主要发生剪切断裂。

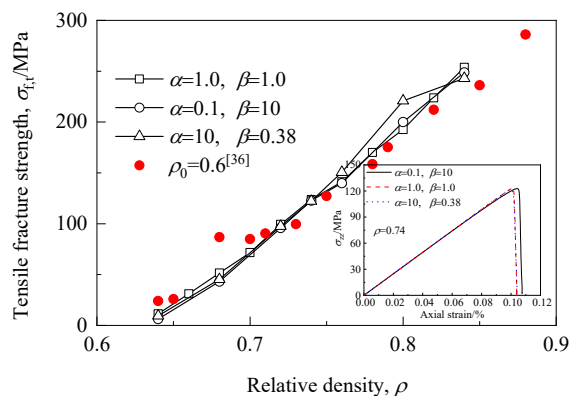


图10 拉伸断裂强度随试样相对密度的变化
Fig.10 Variations of tensile fracture strength with the relative density of sample

图11给出了对应的压缩模拟结果。对比图10可以看到,三种参数设置下模拟得到的压缩断裂强度都高于拉伸断裂强度,这符合典型陶瓷材料的力学特性。然而,与拉伸加载不同,这三种参数设置所预测的试样压缩断裂强度 σ_{fc} 存在明显差别:相同相对密度下, $\alpha=0.1, \beta=10$ 时 σ_{fc} 最大, $\alpha=10, \beta=0.38$ 时 σ_{fc} 最小。由于Ostrowski等^[36]并未测试材料的压缩强度,因此无法直接判断所考察的三种参数设置哪种更合理。Miyake等^[39]研究了

Al_2O_3 粉末颗粒的形状对烧结特性及烧结所得陶瓷材料压缩强度的影响。在他们的实验中, 球形 Al_2O_3 粉末颗粒的粒径约 $0.6 \mu\text{m}$ 。为与 Miyake 等^[39]的实验结果进行直接对比, 本研究模拟了颗粒粒径 $0.6 \mu\text{m}$ 下数值试样的断裂强度。由图 11 可看出, 考虑到实验误差, 三种参数设置中, $\alpha=\beta=1$ 的模拟结果能与 Miyake 等的实验结果定量吻合。综合图 10 和 11 可知, 对于给定的试样, DEM 模拟中只可能存在一种 (α, β) 组合, 使得模拟预测的拉伸和压缩断裂强度都能与实验值定量吻合; 对于本研究考察的部分烧结 Al_2O_3 陶瓷材料, $\alpha=\beta=1$ 时模拟预测的杨氏模量、拉伸断裂强度和压缩断裂强度均能与文献报道的实验结果定量吻合。

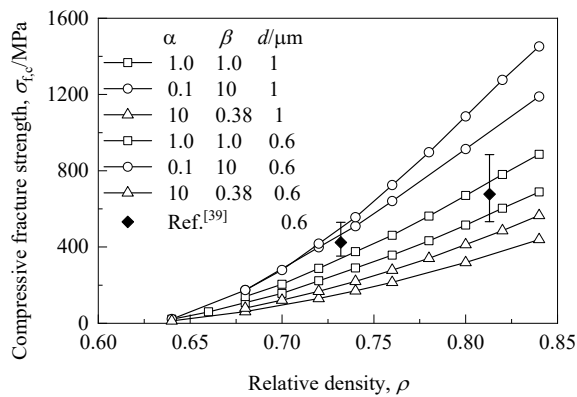


图 11 压缩断裂强度随试样相对密度的变化

Fig.11 Variations of compressive fracture strength with the relative density of sample

Tan 等^[13]和 Jiang 等^[23]($\alpha=0.1$)及 Eckhard 等^[26]($\alpha=10$)的工作中, DEM 模拟结果也都能与实验数据定量吻合。 $\alpha<1$ 时, Tan 等和 Jiang 等模拟得到的拉伸和压缩

断裂强度均能与实验结果定量吻合。这可能与他们的研究工作基于二维 DEM 模拟有关。Warner 等^[24]的二维 FEM 压缩模拟中, 晶界的剪切强度为拉伸强度的 15%, 但晶界的主导破坏模式仍为拉伸破坏。这说明与三维体系不同, 二维情况下无论拉伸加载还是压缩加载, 固体键的主导破坏模式均为拉伸破坏, 因此固体键的临界拉伸强度决定了试样的宏观拉伸/压缩断裂强度。由图 10 可看到, 对于 $\alpha=0.1$ 和 1 两种参数设置, 为得到相同的拉伸断裂强度, β 的设置需保证固体键拉伸强度恰好相

同($\sigma_{c,t}=\alpha\sigma_{c,s}=\alpha\beta\sqrt{\frac{E}{1-\nu^2}}\frac{\Gamma}{\pi a_b}=\sqrt{\frac{E}{1-\nu^2}}\frac{\Gamma}{\pi a_b}$)。Eckhard 等^[26]

仅对比了压缩加载下的模拟与实验结果。由图 10 和 11 可看出, 对于拉伸和压缩断裂强度, 如果仅需保证其中之一与实验结果相吻合, 会存在多种不同的 (α, β) 组合。

尽管图 10 和 11 未给出模拟数据的方差, 但辅助模拟结果与前期模拟结果一致^[4,19], 对于所有的数据点, 其方差小于 1%, 几乎可忽略。由图 3 中的插图可看出, 对于所制备的数值试样, 固体键半径 a_b 存在一定的分布, 而固体键的断裂难易程度与 a_b 直接相关[式(3)~(5)]。这说明陶瓷材料的宏观断裂强度对微观晶界尺寸的具体分布不敏感。为进一步证实此结论, 模拟研究了固体键强度分布对试样拉伸和压缩断裂强度的影响。考察固体键强度而非固体键半径, 是因为后者的变化同时影响前者, 不利于开展参数敏感性分析。模拟中将所有固体键半径固定为 $a_b/R=0.4$, 固体键临界断裂强度 $\sigma_{c,t}=\sigma_{c,s}=1.2 \text{ GPa} \pm \Delta\sigma_{\text{bond}}$ 。考察了三种情况: $\Delta\sigma_{\text{bond}}=0$ 、高斯分布、均匀分布, 后两者情况下 $\Delta\sigma_{\text{bond}}=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0 \text{ GPa}$ 。

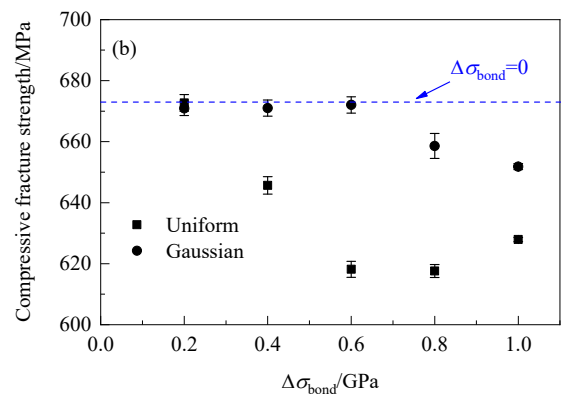
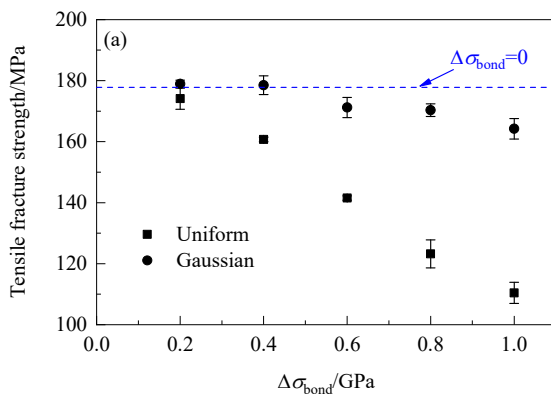


图 12 固体键强度分布对拉伸和压缩断裂强度的影响

Fig.12 Influences of bond strength distribution on the tensile and compressive fracture strengths

图 12 给出了固体键强度分布形式及分布宽度对试样拉伸和压缩断裂强度的影响, 图中每一数据点都为五

组重复性算例结果的平均值。图 12(a)表明, 固体键强度的分布宽度对试样拉伸断裂强度的影响与其具体分布

形式有关。在所考察的分布宽度范围内,均匀分布下随 $\Delta\sigma_{\text{bond}}$ 增大试样拉伸强度明显降低,而高斯分布下 $\Delta\sigma_{\text{bond}}$ 对实验拉伸强度的影响很小。图13给出了 $\Delta\sigma_{\text{bond}}=0.6$ GPa下断裂固体键数目和试样宏观应力随应变的变化。图13(a)表明,在均匀分布条件下,试样完全破坏之前,其内部已经有大量的固体键发生断裂,使得应力应变曲线在加载后期明显偏离了线性;而高斯分布条件下,试

样完全破坏之前,其内部仅有少数固体键断裂,应力应变曲线始终保持线性特征。这主要是因为高斯分布条件下,绝大多数固体键的断裂强度都在平均强度(1.2 GPa)附近;而均匀分布条件下,50%固体键的断裂强度低于平均强度,这些固体键的断裂会显著改变试样内部的应力分布,促进了应力集中,进而使得试样在较小的宏观应力状态下即发生破坏。

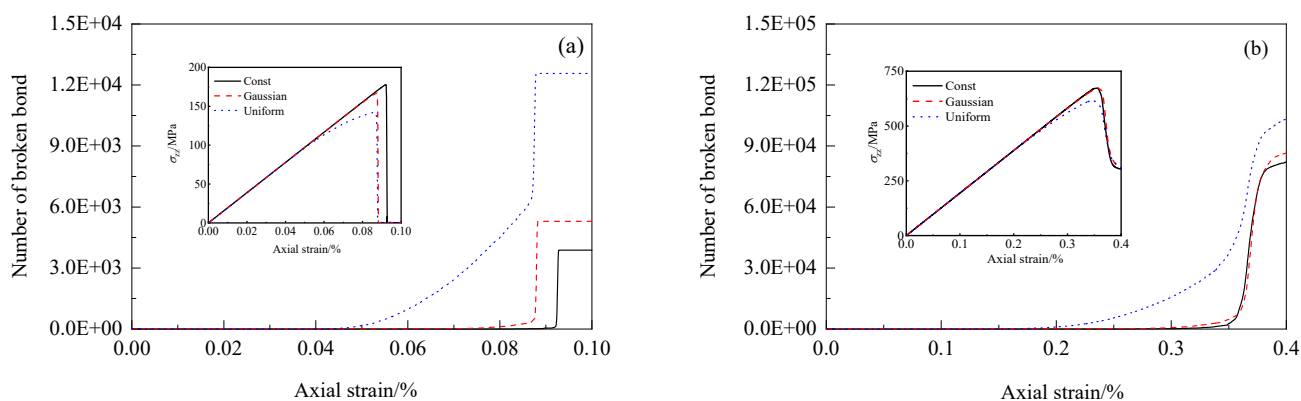


图13 拉伸(a)和压缩(b)加载下应力和固体键断裂数目随应变的变化($\Delta\sigma_{\text{bond}}=0.6$ GPa)

Fig.13 Variations of stress and number of broken bond with strain during the tensile (a) and compressive loading (b) ($\Delta\sigma_{\text{bond}}=0.6$ GPa)

图12(b)表明,压缩加载下,在所考察的分布宽度范围内,无论均匀分布还是高斯分布,其分布宽度对材料压缩断裂强度的影响都不大。类似于拉伸加载,均匀分布条件下,在应力达到峰值之前,试样内部已有大量固体键发生断裂[图13(b)],但这些断裂固体键对试样压缩断裂强度的影响较弱。由图7可看出,在拉伸加载下,在应力达到峰值之前,固体键主要因拉伸作用而断裂。因此固体键断裂之后,颗粒之间的距离大于它们之间的初始绑定距离,两者之间不再有力学作用;而压缩加载下,在应力达到峰值之前,固体键断裂主要是剪切作用所导致,这使得颗粒之间的距离仍可能小于初始绑定距离,在剪切和压缩方向颗粒之间仍可保持力学作用。这可能是压缩加载下试样断裂强度对固体键强度分布宽度不敏感的原因。

定性上,图12所示结果与Kraft等^[40]的二维有限元模拟结果完全吻合。Kraft等考察了恒定、均匀和高斯三种固体键强度分布形式对试样拉伸断裂强度的影响。他们的模拟结果表明,恒定固体键强度和固体键强度呈高斯分布下,模拟预测的试样拉伸断裂强度非常接近,而均匀分布下拉伸断裂强度最低。高斯分布下材料拉伸强度比恒定固体键条件下的材料拉伸强度略高,尽管两者之间差别很小。他们推测这可能是因计算能力所限,模拟试样的尺寸太小所导致(模拟试样由30个晶粒组

成)。本工作中也观察到类似现象,如图12(a)所示。本工作所模拟的试样由约54000个颗粒构成,并进行了5组重复性验证,因此可认为图12(a)所示的高斯分布下($\Delta\sigma_{\text{bond}}=0.2, 0.4$ GPa)的拉伸强度略高应该不是模拟误差。由于高斯分布和恒定固体键强度下模拟得到的拉伸断裂强度差别非常小,目前还未能分析出造成这种现象的原因。

图12考察了固体键强度而非固体键尺寸对试样断裂强度的影响,可能对数值模拟尤其是有限元模拟有一定借鉴意义。有限元模拟中,一些研究人员倾向于将晶界的黏附能处理为在一定范围内分布而非恒定值^[40]。理论上,晶界的强度与材料本身的力学属性、晶界的几何形状和尺寸、晶界附近的缺陷等很多因素有关^[27,28],而这些因素同时也会影响材料本身的力学响应特性。以晶界尺寸为例,它既会影响晶界的破坏强度[式(5)],也会影响晶粒间力学作用强度(见表1)。因此,高斯分布下分布宽度($\Delta\sigma_{\text{bond}}$)对试样断裂强度影响不大,并不表明试样的微观结构对试样宏观断裂强度无明显影响。

5 结论

本研究工作基于离散单元法数值模拟,从微观晶粒尺度出发模拟研究了陶瓷材料的力学响应特性。首先基于Affine场压缩策略,实现了数值试样的快速制备,随

后通过开展拉伸加载和压缩加载数值模拟, 考察分析了试样的力学破坏过程。得到如下结论:

(1) 拉伸加载下, 试样的破坏过程呈现出“成核”效应, 裂纹一旦在局部形成, 即会沿加载截面迅速扩展, 导致试样破坏; 压缩加载下, 则呈现“聚并”效应, 应力损伤在试样内不同区域逐步形成, 这些损伤逐渐连接贯通, 最终导致试样的破坏。破坏模式上, 拉伸加载下固体键的断裂主要源于拉伸作用, 而压缩加载下则主要源于剪切作用。

(2) 对于给定的试样, 只存在一种拉伸/剪切固体键临界强度组合, 使得模拟预测的试样拉伸断裂强度和压缩断裂强度都能与实验结果吻合。对于所考察的部分烧结 Al_2O_3 陶瓷材料, 保持固体键的拉伸和剪切断裂强度相等时, DEM 模拟预测的试样拉伸和压缩断裂强度都能与实验结果定量吻合。

(3) 压缩加载下, 固体键强度的分布形式和分布宽度对模拟试样的断裂强度影响不大; 拉伸加载下, 固体键强度的分布宽度对模拟试样断裂强度的影响取决于其具体分布形式: 均匀分布下, 增大分布宽度会导致试样的断裂强度显著减小; 而高斯分布下, 试样的断裂强度基本不受分布宽度影响。

参考文献

- [1] Fan X, Case E D, Ren F, et al. Part I: porosity dependence of the Weibull modulus for hydroxyapatite and other brittle materials [J]. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 2012, 8: 21–36.
- [2] Liu X, Martin C L, Delette G, et al. Microstructure of porous composite electrode generated by the discrete element method [J]. *Journal of Power Sources*, 2011, 196(4): 2046–2054.
- [3] Liu X, Martin C L, Bouvard D, et al. Strength of highly porous ceramic electrodes [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2011, 94(10): 3500–3508.
- [4] Liu X, Martin C L, Delette G, et al. Elasticity and strength of partially sintered ceramics [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2010, 58(6): 829–842.
- [5] Keleş Ö, García R E, Bowman K J. Stochastic failure of isotropic, brittle materials with uniform porosity [J]. *Acta Materialia*, 2013, 61(8): 2853–2862.
- [6] Bruno G, Kachanov M. Microstructure-property connections for porous ceramics: the possibilities offered by micromechanics [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2016, 99(12): 3829–3852.
- [7] Potyondy D O, Cundall P A. A bonded-particle model for rock [J]. *International Journal of Rock Mechanics and Mining Sciences*, 2004, 41(8): 1329–1364.
- [8] 孙其诚, 刘晓星, 张国华, 等. 密集颗粒物质的介观结构 [J]. *力学进展*, 2017, 47: 263–308.
Sun Q C, Liu X X, Zhang G H, et al. The mesoscopic structures of dense granular materials [J]. *Advances in Mechanics*, 2017, 47: 263–308.
- [9] Jauffres D, Martin C L, Lichtner A, et al. Simulation of the toughness of partially sintered ceramics with realistic microstructures [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(12): 4685–4694.
- [10] Jauffres D, Martin C L, Lichtner A, et al. Simulation of the elastic properties of porous ceramics with realistic microstructure [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2012, 20(4): 045009.
- [11] Hedjazi L, Martin C L, Guessasma S, et al. Application of the discrete element method to crack propagation and crack branching in a vitreous biopolymer material [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2013, 49(13): 1893–1899.
- [12] Huang H, Spencer B, Hales J. Discrete element method for simulation of early-life thermal fracturing behavior in ceramic nuclear fuel pellets [J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2014, 278: 515–528.
- [13] Tan Y, Yang D, Sheng Y. Study of polycrystalline Al_2O_3 machining cracks using discrete element method [J]. *International Journal of Machine Tools and Manufacture*, 2008, 48(9): 975–982.
- [14] Tan Y, Yang D, Sheng Y. Discrete element method (DEM) modeling of fracture and damage in the machining process of polycrystalline SiC [J]. *Journal of the European Ceramic Society*, 2009, 29(6): 1029–1037.
- [15] Yu Y, Wang W, He H, et al. Modeling multiscale evolution of numerous voids in shocked brittle material [J]. *Physical Review E*, 2014, 89(4): 043309.
- [16] Yu Y, Wang W, He H, et al. Mesoscopic deformation features of shocked porous ceramic: polycrystalline modeling and experimental observations [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 117(12): 125901.
- [17] Yu Y, Cao X, Yang J, et al. Delayed fracture of porous ceramics under shock-wave compression [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2019, 208: 38–44.
- [18] Jauffres D, Liu X, Martin C L. Tensile strength and toughness of partially sintered ceramics using discrete element simulations [J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2013, 103: 132–140.
- [19] 周爽, 苏景林, 刘晓星, 等. 多孔陶瓷材料力学特性的离散单元法定量模拟 [J]. *中国科学: 物理学 力学 天文学*, 2019, 49(6): 064602.
Zhou S, Su J L, Liu X X, et al. Quantitative simulation of mechanical properties of porous ceramic materials by discrete element method [J]. *Science China: Physics, Mechanics & Astronomy*, 2019, 49(6): 064602.
- [20] Martin C L, Camacho-Montes H, Olmos L, et al. Evolution of defects during sintering: discrete element simulations [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2009, 92(7): 1435–1441.
- [21] Arevalo R, Zuriguel I, Maza D. Topology of the force network in the jamming transition of an isotopically compressed granular packing [J]. *Physical Review E*, 2010, 81(4): 041302.
- [22] Kumar R, Rommel S, Jauffres D. Effect of packing characteristics on the discrete element simulation of elasticity and buckling [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2016, 110: 14–21.
- [23] Jiang S, Li X, Tan Y, et al. Discrete element simulation of SiC ceramic with pre-existing random flaws under uniaxial compression [J]. *Ceramics International*, 2017, 43(16): 13717–13728.
- [24] Warner D H, Molinari J F. Micromechanical finite element modeling of compressive fracture in confined alumina ceramic [J]. *Acta Materialia*, 2006, 54(19): 5135–5145.
- [25] Martin C L, Bouvard D, Delette G. Discrete element simulations of

- the compaction of aggregated ceramic powders [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2006, 89(11): 3379–3387.
- [26] Eckhard S, Fries M, Antonyuk S, et al. Dependencies between internal structure and mechanical properties of spray dried granules –experimental study and DEM simulation [J]. *Advanced Powder Technology*, 2017, 28(1): 185–196.
- [27] Fujita H, Jefferson G, McMeeking R M, et al. Mullite/alumina mixture for use as porous matrices in oxide fiber composites [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2004, 87(2): 261–267.
- [28] Freund L B, Chason E. Model for stress generated upon contact of neighboring islands on the surface of a substrate [J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(9): 4866–4873.
- [29] Bouvard D, McMeeking R M. Deformation of interparticle necks by diffusion controlled creep [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 1996, 79(3): 666–672.
- [30] Martin C L, Bordia R K. The effect of a substrate on the sintering of constrained films [J]. *Acta Materialia*, 2009, 57(2): 549–558.
- [31] Coble R L. Initial sintering of alumina and hematite [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 1958, 41(2): 55–62.
- [32] Midi G D R. On dense granular flows [J]. *The European Physical Journal E*, 2004, 14(4): 314–365.
- [33] Thornton C, Antony S J. Quasi-static deformation of particulate media [J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A*, 1998, 356(1747): 2763–2782.
- [34] Liu X, Papon A, Muhlhaus H. Numerical study of structural evolution in shear band [N]. *Philosophical Magazine*, 2012, 92: 3501–3519.
- [35] de Klerk A. Voidage variation in packed beds at small column to particle diameter ratio [J]. *AIChE Journal*, 2003, 49(8): 2022–2029.
- [36] Ostrowski T, Ziegler A, Bordia K R, et al. Evolution of Young's modulus, strength, and microstructure during liquid-phase sintering [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 1998, 81(7): 1852–1860.
- [37] Ostrowski T, Rodel J. Evolution of mechanical properties of porous alumina during free sintering and hot pressing [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 1999, 82(11): 3080–3086.
- [38] Wang Y, Steffen A, Latham S, et al. Implementation of particle-scale rotation in the 3-D lattice model [J]. *Pure and Applied Geophysics*, 2006, 163(9): 1769–1785.
- [39] Miyake K, Hirata Y, Shimonosono T, et al. The effect of particle shape on sintering behavior and compressive strength of porous alumina [J]. *Materials*, 2018, 11(7): 1137.
- [40] Kraft R H, Molinari J F. A statistical investigation of the effects of grain boundary properties on transgranular fracture [J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(17): 4739–4749.