

类玻璃体多颗粒系统热重塑行为的离散元模拟

吴治诚¹, 郭巍¹, 张泽昊¹, 朱清哲¹, 张乔根¹, 王国利², 高超²

(1. 西安交通大学电工材料电气绝缘全国重点实验室, 710049, 西安;

2. 南方电网科学研究院有限责任公司, 510663, 广州)

摘要: 针对难降解环氧固废所带来的资源环境问题, 基于高温下动态交联键可重排的类玻璃体高分子(Vitrimer)材料, 开展了多颗粒系统热重塑行为的离散元模拟研究。考虑到颗粒间复杂的相互作用, 引入 Vitrimer 本构模型, 并结合堆积角标定实验来确定颗粒摩擦因数, 建立了多颗粒系统“形变-接触-反应”的热-力耦合离散元模型, 实现了热重塑过程中颗粒间应力、温度与孔隙演变的数值模拟。结果表明: Vitrimer 多颗粒系统热重塑过程中, 颗粒间切向压力是法向压力的 3.7 倍, 热重塑反应过程主要沿切向来进行; 颗粒间存在较大温度梯度, 最大温差为 43 °C, 可采用梯度温控策略以抑制键网络异构化; 热重塑压力要与材料储能模量相匹配, 从而可协同调控孔隙率与结构的完整性。经过实验验证, 热重塑后材料三点弯曲断裂载荷实测值、模拟值分别为 10.4、9.9 N, 表明模型可有效模拟 Vitrimer 多颗粒系统的热重塑过程。研究结果可为探究 Vitrimer 多颗粒系统热重塑的外部条件、颗粒行为提供一定的理论依据, 并可为发展绿色循环材料体系提供技术支撑。

关键词: 类玻璃体; 热重塑; 离散元方法; 多颗粒系统

中图分类号: TM211 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/jxtxb202602017 **文章编号:** 0253-987X(2026)02-0175-08

Discrete Element Simulation of Thermal Remodeling Behavior in Vitrimer Multi-Particle Systems

WU Zhicheng¹, GUO Wei¹, ZHANG Zehao¹, ZHU Qingzhe¹,

ZHANG Qiaogen¹, WANG Guoli², GAO Chao²

(1. State Key Laboratory of Electrical Insulation and Power Equipment, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Electric Power Research Institute, China Southern Power Grid Co., Ltd., Guangzhou 510663, China)

Abstract: To address the resource and environmental issues caused by non-degradable epoxy solid waste, a discrete element simulation study on the thermal remodeling behavior of multi-particle systems was conducted, based on vitrimer materials capable of dynamic cross-link rearrangement at high temperatures. Considering the complex interactions between particles, a vitrimer constitutive model was introduced. The particle friction coefficient was determined through angle of repose calibration experiments. A thermo-mechanical coupled discrete element model integrating “deformation-contact-reaction” mechanisms for multi-particle systems was established, enabling the numerical simulation of inter-particle stress, temperature, and pore evolution during the thermal remodeling process. The results indicate that during the thermal remodeling of the vitrimer multi-particle system, the

收稿日期: 2025-05-19。 作者简介: 吴治诚(1993—), 男, 副教授, 硕士生导师。 基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2023YFB2407100)。

网络出版时间: 2025-09-01

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.T.20250901.1332.002>

tangential pressure between particles is 3.7 times the normal pressure, suggesting that the thermal remodeling reaction proceeds primarily along the tangential direction. A significant temperature gradient exists between particles, with a maximum temperature difference of 43 °C; thus, a graded temperature control strategy can be adopted to suppress bond network heterogeneity. The applied remodeling pressure must match the material's storage modulus to synergistically regulate porosity and structural integrity. Experimental validation shows that the measured and simulated three-point bending fracture loads of the remodeled material are 10.4 N and 9.9 N, respectively, demonstrating that the model effectively simulates the thermal remodeling process of vitrimer multi-particle systems. The findings provide a theoretical basis for investigating the external conditions and particle behavior during the thermal remodeling of vitrimer multi-particle systems and offer technical support for the development of green circular material systems.

Keywords: Vitrimer; thermal remodeling; discrete element method; multi-particle systems

干式变压器、绝缘件和套管等环氧树脂材料广泛应用于各类电力设备,是支撑电网发展的重要基础性材料^[1]。但是,由于环氧树脂具有稳定的三维交联网络结构^[2],难以降解,其固废不仅导致资源浪费^[3],更引发了严峻的环境污染问题,严重阻碍了“双碳”目标下电网绿色化转型进程^[4-5]。近年来,基于动态共价键交换反应的类玻璃高分子(Vitrimer)等新兴材料陆续出现,为实现环氧树脂材料的高效回收提供了创新思路^[6]。相较于传统热固性树脂,Vitrimer 材料具有可逆的动态交联网络结构^[7],在高温条件下能够通过热、光、化学反应等外部刺激实现交联键的重排,展现出类似热塑性材料的可重塑性^[8-10],为电工环氧材料的循环再生开辟了全新路径。

然而,Vitrimer 材料的热重塑过程涉及动态共价键的断裂重组、颗粒间非均匀接触与应力传递,以及温度-压力的多物理场耦合^[11]。受限于传统表征技术的时间-空间分辨率,许多学者对 Vitrimer 材料热回收过程开展了仿真研究。Zhao 等^[12]采用粗粒化分子动力学揭示了键交换反应对材料力学恢复的调控规律。Yu 等^[13]研究了键交换反应在本体内和界面处的动力学关系,建立了跨界力学本构模型,并将力学本构模型拓展到有限元模拟,实现了数值分析和预测界面黏合过程以及界面性能。Yu 等^[14]通过构建二维热-力模型,揭示了颗粒间动态交换反应的热场-应力场协同调控规律。研究揭示了 Vitrimer 材料在微观层面颗粒间的键交换反应,但难以反映三维热-力耦合作用下多颗粒系统“形变-接触-反应”的演变过程,制约了工程化回收工艺的优化设计。

综上所述,本文根据 Vitrimer 颗粒的接触行为

和融合过程,构建了多颗粒系统“形变-接触-反应”离散元模型。在获得颗粒的尺寸分布后,引入颗粒堆积角标定方法精确表征界面摩擦特性,建立了 Vitrimer 多颗粒系统热重塑模型,该热重塑模型揭示了热压过程中应力场分布、温度梯度演变及孔隙演化规律。通过对比热重塑后材料三点弯曲的力学性能,验证了仿真模型的准确性和有效性。

1 Vitrimer 颗粒接触模型及参数标定

1.1 Vitrimer 颗粒热重塑仿真流程

Vitrimer 颗粒热重塑仿真流程包括如下 3 个步骤:①确立 Vitrimer 颗粒接触模型;②获得颗粒的热重塑参数;③建立仿真模型并验证三点弯曲力学性能,如图 1 所示。

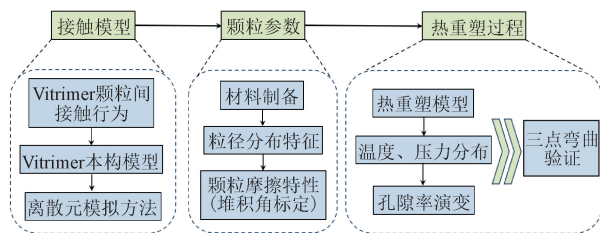


图 1 Vitrimer 颗粒热重塑离散元仿真流程

Fig. 1 Simulation process of Vitrimer particles thermal remodeling using discrete element method

由图 1 可知,步骤①的目的是引入动态键交换反应的力学本构方程,实现微观键交换行为与宏观力学响应的映射。在步骤②中确定了 Vitrimer 颗粒的粒径参数,并通过堆积角实验标定了颗粒间的摩擦特性。在获得仿真参数后,步骤③利用 EDEM 软件建立三维多颗粒系统热重塑模型,模拟了颗粒热重塑的温度、压力分布以及孔隙率演变规律,进一

步对比三点弯曲实验仿真与实测力学强度,验证了模型的可靠性。

1.2 Vitrimer 颗粒接触模型

Vitrimer 颗粒的热重塑过程实质上是不同尺寸颗粒在温度-压力耦合作用下,发生“形变-接触-反应”的融合过程。在热重塑温度下,Vitrimer 材料向高弹态转变,在受到压力后发生形变,其颗粒间接触行为趋近于弹性体响应。因此,采用 Hertz-Mindlin 理论描述 Vitrimer 颗粒在接触时的形变与摩擦滑移行为^[15-16]。颗粒发生形变后,接触面积 A 是颗粒间的最大重叠横截面积,由颗粒间的法向重叠量 δ_1 确定。法向重叠量大小根据颗粒间法向力计算^[17],即

$$\begin{cases} F_1 = \frac{4}{3}E^*\sqrt{R^*}\delta_1^{3/2} \\ \frac{1}{E^*} = \frac{(1-\nu_i^2)}{E_i} + \frac{(1-\nu_j^2)}{E_j} \\ \frac{1}{R^*} = \frac{1}{R_i} + \frac{1}{R_j} \end{cases} \quad (1)$$

式中: F_1 为法向力; E^* 为等效弹性模量; R^* 为等效半径; E_i, E_j 为颗粒 i, j 的弹性模量; R_i, R_j 为颗粒的半径; ν_i, ν_j 为颗粒的泊松比; δ_1 为颗粒法向重叠量。

基于 Mindlin-Deresiewicz 理论^[18],切向力分量计算式如下

$$\begin{cases} F_2 = -S_2\delta_2 \\ S_2 = 8G^*\sqrt{R^*}\delta_1 \end{cases} \quad (2)$$

式中: F_2 为切向力; S_2 为切向强度; G^* 为剪切模量; δ_2 为颗粒切向重叠量。

通过式(1)、式(2)计算得到的 Vitrimer 颗粒间法向力与切向力,直接反映了形变-接触阶段的力学状态,进而支撑后续反应阶段的模拟。在表征颗粒间融合过程时,可采用 Vitrimer 网络晶格模型进行描述^[13]。在该模型中,分子键密度指界面处动态共价键的数量,在数值上与链密度相等,反映了 Vitrimer 的界面融合程度。理想情况下界面处的归一化链密度随时间的演变规律如下

$$n_t = \frac{n(t)}{n_0} = \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{6}}{4}\sqrt{\frac{t_R}{t}}\right)\right) \quad (3)$$

式中: t_R 为特征弛豫时间; t 为反应时间; n_0 为体相链密度; $n(t)$ 为 t 时刻时界面处的链密度; n_t 为 t 时刻的界面融合率。

Vitrimer 颗粒热重塑后的界面黏结强度 $\mathbf{K}$ 与归一化界面链密度成正比,即

$$\|\mathbf{K}\| = n_t K_0 \quad (4)$$

式中: K_0 为 Vitrimer 界面相参数。

将式(1)~(4)直接用于多颗粒系统时面临显著挑战,即热重塑过程颗粒数量级为 10^5 ,如果考虑到每个颗粒的特征弛豫时间,将耗费巨大的算力成本。因此,针对计算瓶颈进行关键简化,即采用离散元模拟方法,每个颗粒将作为单独理想的球形颗粒。假设两个颗粒间的黏结是通过一个虚拟的 Bond 键连接^[19],当热重塑时间达到 t_b 时,处于黏结半径范围 R_B 内的颗粒黏结形成统一整体,如图 2 所示。

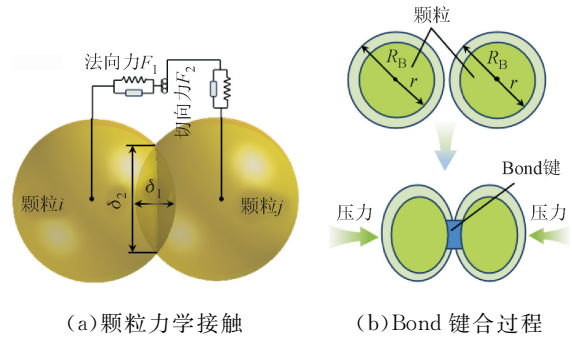


图2 Vitrimer 颗粒接触模型

Fig. 2 Contact model for Vitrimer particles

Vitrimer 颗粒的黏结时间 t_b 由温度-时间协同下的界面融合度决定,其演变规律如下

$$\ln t_b = \ln \tau - \frac{E_a}{RT} \quad (5)$$

式中: τ 为指前因子; T 为绝对温度; R 为摩尔气体常数; E_a 为跨界面反应活化能。

Bond 键在外力作用下会发生形变,当形变产生的力或力矩达到颗粒间黏结强度阈值时,Bond 键断裂,断裂阈值计算式为

$$\begin{cases} K_1 = -\frac{F_1}{A} + \frac{2M_2}{J}R_B \\ K_2 = -\frac{F_2}{A} + \frac{M_1}{J}R_B \end{cases} \quad (6)$$

式中: A 为接触面积; R_B 为黏结半径; J 为颗粒的惯性矩; F_1, F_2 为切向力和法向力; M_1, M_2 为法向力矩和切向力矩; K_1 为法向剪切强度; K_2 为切向剪切强度。

通过超声反射法测量得到 Vitrimer 材料的跨界面活化能 E_a 为 89 kJ/mol。200 °C 条件下热重塑时间达到 t_b 时 Vitrimer 材料的界面融合率为 63%,由式(4)界面黏结强度 $\mathbf{K}$ 正交分解得 K_1 为 1×10^7 N/m, K_2 为 5×10^6 N/m。由式(4)~(6)可计算得不同温度-时间作用下颗粒间的黏结强度,热重塑后材料的黏结强度随温度变化结果如下

$$\ln \frac{K}{K_r} = -\frac{E_a}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_r} \right) \quad (7)$$

式中: $T_r = 473 \text{ K}$ 为参考温度; K_r 为对应温度热重塑后材料的黏结强度。

1.3 Vitrimer 材料制备

以一种环氧 Vitrimer 材料为例^[20], 其具备良好的热重塑特性, 制备过程如下: 将 0.1 mol 双酚 A 型环氧树脂与 0.03 mol 二硫代二丙酸混合, 于 150°C 油浴中搅拌至溶液呈澄清态; 随后, 加入 0.05 mol 甲基四氢苯酐, 搅拌 10 min , 待体系冷却至 80°C 后, 加入 0.01 mol 三乙醇胺, 继续搅拌混合并真空脱泡 5 min ; 将材料浇筑至预热模具中, 按三阶段程序固化, 即 120°C 下固化 2 h , 140°C 下固化 3 h , 160°C 下固化 3 h 。

该 Vitrimer 材料的玻璃化转变温度与拓扑冻结转变温度分别为 81.56°C 。当温度低于 81°C 时, 储能模量维持在 1600 MPa , 表现出典型玻璃态特征; 温度高于 81°C 时, 储能模量骤减至 13 MPa , 标志着材料进入高弹态^[21]。Vitrimer 的热重塑窗口温度应大于玻璃化转变温度与拓扑冻结转变温度, 实际 Vitrimer 颗粒呈不规则形貌, 在热重塑温度下, 颗粒在压力作用下发生显著形变, 这种变形会大幅弱化初始形状不规则的影响, 应力分布符合 Hertz-Mindlin 理论。

1.4 Vitrimer 颗粒的粒径分布特征

在离散元仿真中, 颗粒的粒径分布是影响模拟结果精度和可靠性的关键因素。然而, 实际 Vitrimer 颗粒的粒径通常表现出不均性, 这种不均匀的颗粒分布显著影响物料流动、热重塑力学性能以及相互作用的模拟结果。采用激光粒度仪对颗粒样本的粒度分布进行表征, 获得了 Vitrimer 颗粒平均粒径和粒径分布范围, 如图 3 所示。

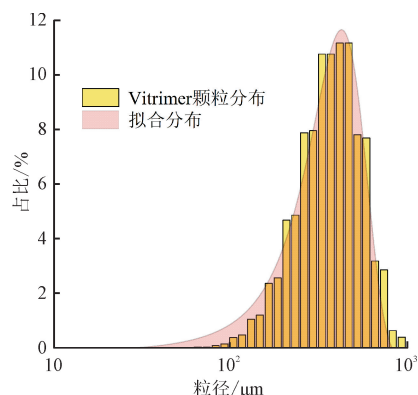


图 3 Vitrimer 颗粒粒径分布

Fig. 3 Particle size distribution of Vitrimer

由图 3 可知, Vitrimer 颗粒粒径分布呈现单峰分布特征, 峰值特征粒径为 $426 \mu\text{m}$, 90% 颗粒群体粒径为 $100 \sim 900 \mu\text{m}$ 。由于粒径差异较大的颗粒在堆积过程中可能导致局部应力集中, 故应通过堆积角标定实验进一步量化摩擦参数, 从而为颗粒间应力传导与融合行为提供初始条件。

1.5 Vitrimer 颗粒堆积角标定

颗粒间的摩擦因数作为离散元模拟的初始条件, 其数值直接影响颗粒体系的相互作用强度及热重塑过程的应力传导效率^[22]。本节采用静态堆积角实验来标定颗粒间的摩擦参数, 所需圆筒直径为 8 mm , 高度为 24 mm ^[23]。实验过程中, 将填满 Vitrimer 颗粒的圆筒垂直置于基板上, 以恒定速度 0.05 m/s 提升, 使颗粒自由流散形成稳定锥形堆积体。通过数字图像处理系统测量单侧堆积角, 重复 5 次实验后取平均值, 计算得到实际颗粒的堆积角为 24.3° 。

使用离散元方法对 Vitrimer 颗粒堆积角进行验证, 生成圆筒几何体并填充 Vitrimer 颗粒, 待填满无底圆筒体后, 设置圆筒以 0.05 m/s 的垂直速度释放颗粒。模拟过程中 Vitrimer 颗粒的材料参数选用如表 1 所示, 其中法向与切向剪切强度由 1.2 节中界面黏结强度确定。

表 1 Vitrimer 材料参数

Table 1 Material parameters of Vitrimer

参数	数值
泊松比	0.25
颗粒密度/ $(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	1.2
弹性模量(室温)/MPa	1 614.4
弹性模量(重塑温度)/MPa	13.6
导热系数/ $(\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	0.2
颗粒静摩擦系数	0.5
颗粒滚动摩擦系数	0.3
颗粒恢复系数	0.25
法向剪切强度 $K_1/(\text{N} \cdot \text{m}^{-1})$	1×10^7
切向剪切强度 $K_2/(\text{N} \cdot \text{m}^{-1})$	5×10^6
拉伸强度/MPa	25.0

随着圆筒以垂直方向运动, Vitrimer 颗粒逐渐在平面上堆积, 模拟过程如图 4 所示。重复 5 次实验后取平均值, 得到模拟颗粒堆积角为 23.6° , 与实际堆积角相差 2.83% , 在误差允许范围内。该标定

结果证实了材料参数的准确性,为后续热重塑过程模拟建立了可信的数值模型。

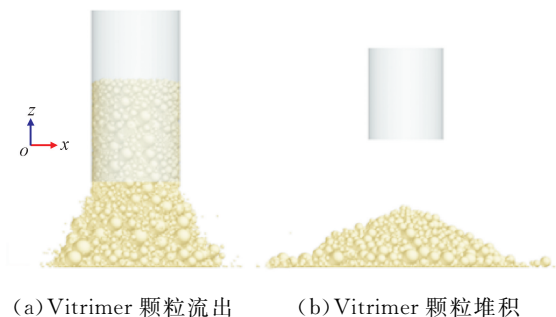


图 4 Vitrimer 颗粒堆积模拟过程

Fig. 4 Accumulation simulation of Vitrimer particles

2 Vitrimer 多颗粒系统热重塑

2.1 Vitrimer 热重塑模型建立

在明确颗粒间的摩擦因数后,建立 Vitrimer 热重塑模型。利用离散元法构建半径为 10 mm、长度为 20 mm 的不锈钢圆筒形模具,压片机简化为几何匹配的圆柱形压头,半径和长度分别为 10、5 mm,其与模具配合关系如图 5 所示。模具外壁及压头表面均设置为恒温边界条件 $T_r = 473$ K,热量通过热传导持续作用于颗粒系统,压缩过程中温度场保持恒定。向模具中填充 5.0 g 的 Vitrimer 颗粒,驱使压片机向下压缩,压缩速率为 0.03 m/s,压强大小为 10 MPa,待到颗粒系统稳定时间 86 min 达到 t_b 后,颗粒间发生融合。热重塑后,Vitrimer 颗粒由原先的不规则颗粒排布重塑为圆片状整体。

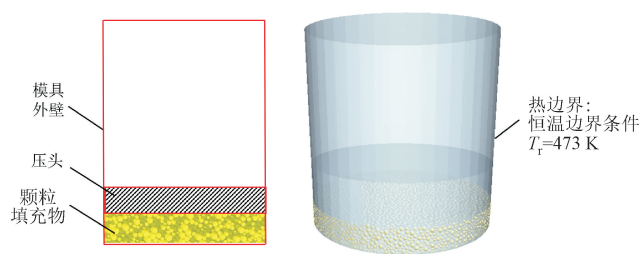


图 5 Vitrimer 颗粒热重塑模型

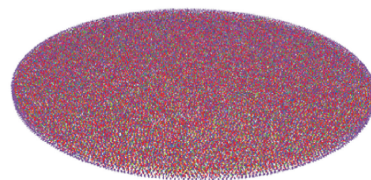
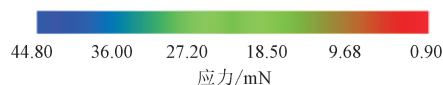
Fig. 5 Vitrimer particles thermal remodeling model

2.2 结果分析

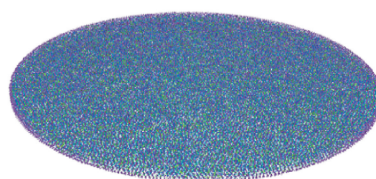
2.2.1 热重塑过程应力分布

Vitrimer 颗粒填充物厚度在热压后明显减小,颗粒间发生融合,包括法向融合和切向融合。颗粒间的法向融合由垂直于接触面的法向力主导,通过颗粒法向重叠实现界面间的紧密物理贴合;切向融

合则由平行于接触面的剪切力驱动,促进 Vitrimer 界面动态滑移,显著增强界面分子链段的相互扩散与缠结,使分子链沿界面延展。热压后颗粒间的应力分布如图 6 所示。



(a)法向应力云图



(b)切向应力云图

图 6 Vitrimer 颗粒应力云图

Fig. 6 Bonding force contour map of Vitrimer particles

由图 6 可知,Vitrimer 颗粒间法向应力集中在 20 mN,切向应力集中在 5.7 mN。经计算得,Vitrimer 颗粒间法向接触面积为 $7.64 \times 10^{-9} \text{ m}^2$,切向接触面积为 $5.91 \times 10^{-10} \text{ m}^2$ 。从而在 200 °C、10 MPa 条件下,环氧 Vitrimer 颗粒间法向压强为 2.6 MPa,切向压强为 9.64 MPa,这表明 Vitrimer 颗粒的热重塑反应在界面处呈显著的切向主导趋势。

2.2.2 热重塑过程温度分布

温度作为调控 Vitrimer 材料键交换反应动力学的关键参数,直接影响热压过程中动态共价键网络的重构效率^[24]。基于离散元方法得到的颗粒温度场云图如图 7 所示,色阶梯度表征颗粒实时温度分布, T_0 为完整热压周期。在 $t = 3/4 T_0$ 时刻之前,颗粒因未受外部挤压作用而呈松散堆积态,此时温度场呈显著非均匀特征,热传导为能量传递主导机制。在 $3/4 T_0$ 到 T_0 的时间范围内,外部挤压力促使颗粒接触面积增加,显著强化了颗粒-热源及颗粒-颗粒间的热传导路径。当边缘颗粒达到设定温度为 200 °C 时,系统呈现径向温度梯度分布特征,中心区域颗粒温度低于外层,最大温差可达 43 °C。

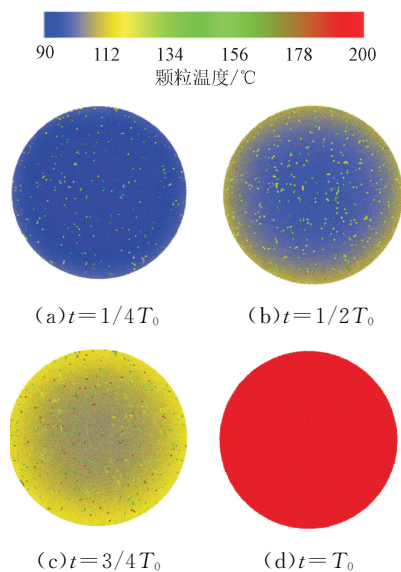


图7 Vitrimer 颗粒温度分布云图

Fig.7 Temperature distribution contour map of Vitrimer particles

由图7可知,加热与挤压的时序协同控制对融合均匀性具有决定性作用。为了实现均匀的颗粒融合过程,提出了如下分阶段梯度加压策略:在颗粒升温阶段施加适度初始压力,即15%~30%的额定压力 p_0 ,增大颗粒间接触面积,加速温度场均衡化,待颗粒系统温度稳定后提升至额定压力。该压力范围可避免局部应力集中导致的颗粒结构损伤,实现热传导效率与结构稳定性的协同优化,如图8所示。

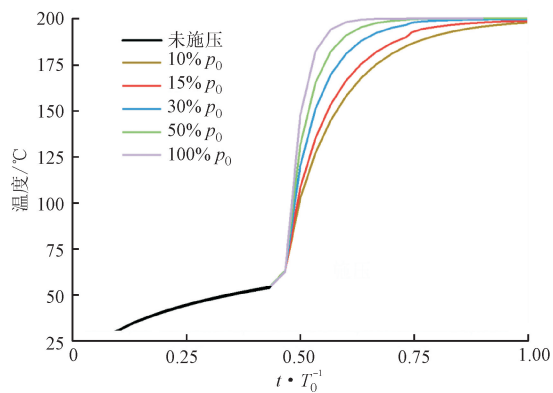


图8 施压条件下颗粒平均温度变化

Fig.8 Variation of average particle temperature under pressure conditions

2.2.3 热重塑过程孔隙率变化

Vitrimer 颗粒在热重塑过程中,热压参数调控能够显著影响 Vitrimer 颗粒的孔隙演化行为。颗粒间的孔隙率在一定程度上代表了颗粒的热重塑效果,孔隙率越低,融合效果越好。200 °C 下压头外施压力对颗粒孔隙率的变化如图9所示。

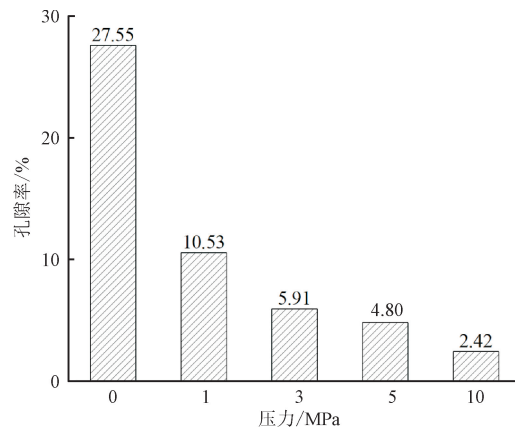


图9 外施压力下颗粒孔隙率变化

Fig.9 Variation of particle porosity under pressures

由图9可知,压头外施压力 p 与最终孔隙率呈显著非线性关系。当压力从0提升至10 MPa时,孔隙率由27.55%急剧下降至2.42%,下降率为91.2%; $p \geq 3$ MPa时,孔隙率下降速率趋于平缓,表明3 MPa是致密化过程趋于饱和的起始压力点。鉴于热重塑温度下颗粒的储能模量为13.6 MPa,建议在实际工艺中采用3~10 MPa压力区间,旨在提供工程安全裕量,即在模拟中压力超过颗粒储能模量将导致颗粒溢出边界;在实际工况下,当应力超过储能模量时,材料进入非线性变形区并引发不可逆损伤,导致热重塑后材料力学性能严重劣化。

2.3 热重塑后材料力学性能实验验证

为了验证 Vitrimer 热重塑模型的准确性,将2.1节中颗粒热重塑后的材料进行三点弯曲对比实验。其中三点弯曲实验模拟设置过程如下:采用半径为1 mm的圆柱形不锈钢模具构建支撑体系,两个支撑点跨距为15 mm,施加的载荷使得材料发生弯曲变形,模拟试样与实际热重塑后材料的尺寸相同,尺寸大小为18 mm×8 mm×2.2 mm的矩形试样,确保实验与仿真边界条件的一致性,实验结果如图10所示。

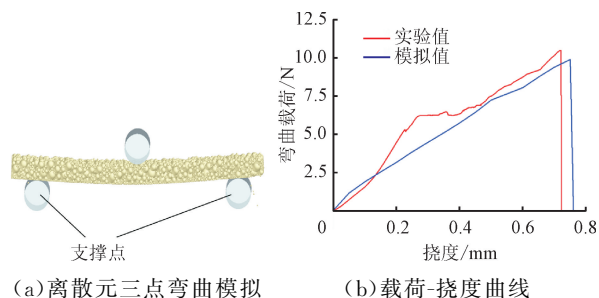


图10 颗粒热重塑后模拟与实验验证

Fig.10 Simulation and experimental verification of particles thermal remodeling

由图 10 可知,经热重塑后材料三点弯曲断裂应力实测值和模拟值分别为 10.4、9.9 N,偏差为 4.8%,弯曲模量计算值分别为 142.3、134.6 MPa。实验结果表明,离散元热重塑模型能有效模拟 Vitrimer 多颗粒系统的热重塑过程。

3 结 论

(1)利用本文构建的离散元模型能够便捷有效地模拟 Vitrimer 多颗粒系统的热重塑过程,得到热力耦合作用下颗粒的应力分布、温度分布和孔隙率变化,并且可以通过三点弯曲模拟实验验证热重塑后材料的力学性能,为探究 Vitrimer 多颗粒系统热重塑的外部条件、颗粒行为提供了理论依据。

(2)基于本文离散元模型,优化 Vitrimer 多颗粒体系热重塑工艺需聚焦如下要素:应力场方向性作为界面融合效率的关键参数,实际回收工艺中须考虑剪切力场以强化分子链滑移;采用梯度温控策略实现温度均匀调控,抑制键网络异构化;设定压力-模量匹配关系以实现致密化与结构完整性协同调控。

(3)通过三点弯曲实验验证了热重塑后材料的力学性能,实验与仿真所得弯曲断裂载荷偏差为 4.8%,结果表明,离散元模型能有效模拟 Vitrimer 多颗粒系统的热重塑过程。研究可进一步引入非球形颗粒模型,以深入探究实际颗粒形状对接触面积计算精度及局部应力分布的影响。

参考文献:

- [1] 周远翔,刘轩昊,朱小倩,等. 低温环境对环氧树脂电气性能的影响 [J]. 高电压技术, 2023, 49(7): 2891-2899.
ZHOU Yuanxiang, LIU Xuanhao, ZHU Xiaoqian, et al. Influence of low-temperature environment on the electrical properties of epoxy resin [J]. High Voltage Engineering, 2023, 49(7): 2891-2899.
- [2] 伍云健,胡益然,林慧,等. 基于席夫碱基的可降解环氧绝缘材料性能研究 [J]. 高电压技术, 2023, 49(11): 4490-4497.
WU Yunjian, HU Yiran, LIN Hui, et al. Study on properties of degradable epoxy insulation materials based on Schiff base [J]. High Voltage Engineering, 2023, 49(11): 4490-4497.
- [3] WU Zhicheng, LIN Binqi, FAN Jiasheng, et al. Effect of dielectric relaxation of epoxy resin on dielectric loss of medium-frequency transformer [J]. IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, 2022, 29(5): 1651-1658.
- [4] 张樱凡,黄正勇,王浩欢,等. 可回收和高性能 3D 打印树脂的制备方法 [J]. 高电压技术, 2023, 49(3): 962-970.
ZHANG Yingfan, HUANG Zhengyong, WANG Hao-huan, et al. Preparation of recyclable and high-performance 3D printing resins [J]. High Voltage Engineering, 2023, 49(3): 962-970.
- [5] 杨国清,蒋超璐,张中杨,等. 冷热冲击下纳米粒子改性硅橡胶/环氧树脂绝缘修复涂料耐电特性 [J]. 高电压技术, 2024, 50(5): 2207-2216.
YANG Guoqing, JIANG Chaolu, ZHANG Zhongyang, et al. Electrical resistance characteristics of nanoparticle-modified silicone rubber/epoxy resin insulation repair coatings under cold thermal shock [J]. High Voltage Engineering, 2024, 50(5): 2207-2216.
- [6] CAPELOT M, UNTERLASS M M, TOURNILHAC F, et al. Catalytic control of the vitrimer glass transition [J]. ACS Macro Letters, 2012, 1(7): 789-792.
- [7] VAN ZEE N J, NICOLAÿ R. Vitrimers: permanently crosslinked polymers with dynamic network topology [J]. Progress in Polymer Science, 2020, 104: 101233.
- [8] SHI Qian, JIN Chenyu, CHEN Zhiqiang, et al. On the welding of vitrimers: chemistry, mechanics and applications [J]. Advanced Functional Materials, 2023, 33(36): 2300288.
- [9] MADDULURI V R, BENDI A. Recent advances in vitrimers: a detailed study on the synthesis, properties and applications of bio-vitrimers [J]. Journal of Polymers and the Environment, 2025, 33(1): 301-322.
- [10] SCHENK V, LABASTIE K, DESTARAC M, et al. Vitrimer composites: current status and future challenges [J]. Materials Advances, 2022, 3(22): 8012-8029.
- [11] MA Jingcheng, PORATH L E, HAQUE M F, et al. Ultra-thin self-healing vitrimer coatings for durable hydrophobicity [J]. Nature Communications, 2021, 12(1): 5210.
- [12] ZHAO Hengheng, WEI Hengheng, FANG Yue, et al. Molecular dynamics simulation of the structural, mechanical, and reprocessing properties of vitrimers based on a dynamic covalent polymer network [J]. Macromolecules, 2022, 55(4): 1091-1103.
- [13] YU Kai, SHI Qian, LI Hao, et al. Interfacial welding of dynamic covalent network polymers [J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2016, 94: 1-17.
- [14] YU Luxia, SUN Xiaohao, JIN Yinghua, et al. Me-

- chanics of vitrimer particle compression and fusion under heat press [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2021, 201: 106466.
- [15] SHI Jianpei, SHAN Zhongde, YANG Haoqin. Research on the macro-and meso-mechanical properties of frozen sand mold based on Hertz-Mindlin with bonding model [J]. *Particuology*, 2024, 88: 176-191.
- [16] SHAIKH S A, LI Yaoming, MA Zheng, et al. Discrete element method (DEM) simulation of single grouser shoe-soil interaction at varied moisture contents [J]. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2021, 191: 106538.
- [17] RICHESSON S, SAHIMI M. Hertz-Mindlin theory of contacting grains and the effective-medium approximation for the permeability of deforming porous media [J]. *Geophysical Research Letters*, 2019, 46(14): 8039-8045.
- [18] ROJEK J. Contact modeling in the discrete element method[M]. Berlin, Germany: Springer International Publishing, 2018: 177-228.
- [19] 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.
- [20] LIU Hechen, SUN Zhanglin, WEI Liwei, et al. Double-dynamic crosslinked epoxy vitrimer resin prepared using transesterification and dynamic disulfide bonds: high-performance, degradable, self-healing, environment-friendly [J]. *Polymer Testing*, 2023, 126: 108145.
- [21] VAN ZEE N J, NICOLAÿ R. Vitrimer chemistry and applications [M]. 2nd ed. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2022: 1-38.
- [22] GUO Zhiguo, CHEN Xueli, LIU Haifeng, et al. Theoretical and experimental investigation on angle of repose of biomass-coal blends [J]. *Fuel*, 2014, 116: 131-139.
- [23] 吴爱祥, 孙业志, 刘湘平. 散体动力学理论及其应用 [M]. 北京: 冶金工业出版社, 2002.
- [24] CAPELOT M, MONTARNAL D, TOURNILHAC F, et al. Metal-catalyzed transesterification for healing and assembling of thermosets [J]. *Journal of the American Chemical Society*, 2012, 134(18): 7664-7667.

(编辑 赵炜)